

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
RIWAYAT HIDUP	i
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS	ii
HALAMAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR SKRIPSI UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	i
ABSTRAK	v
ABSTRACT	vi
KATA PENGANTAR.....	vii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Batasan Masalah.....	4
1.3 Rumusan Masalah	4
1.4 Hipotesis.....	5
1.5 Tujuan Penelitian.....	6
1.6 Manfaat Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	7
2.1 Defenisi Unsur Transisi.....	7
2.2 Sifat-sifat Unsur Transisi	7
2.3 Senyawa Kompleks	9
2.3.1 Stabilitas Ion Kompleks	10
2.3.2 Atom Pusat.....	12
2.3.3 Induksi dan Efek Medan.....	13

2.3.4 Panjang ikatan	13
2.3.5 Sudut Ikatan.....	14
2.4 Senyawa Kompleks Fe(II).....	15
2.4.1 Logam Fe(II)	15
2.4.2 Sifat-sifat Senyawa Kompleks Fe(II).....	15
2.4.3 Sifat Kemagnetan Senyawa Kompleks Fe(II).....	16
2.5 Teori Pembentukan Senyawa Kompleks	16
2.5.1 Teori Ikatan Valensi (<i>Valence Bond Theory/VBT</i>).....	16
2.5.2 Teori Medan Kristal (<i>Crystal Field Theory/CFT</i>).....	17
2.5.3 Teori Medan ligan Pada Kompleks Oktahedral	18
2.5.4 Teori Orbital Molekul (<i>Molecular Orbital Theory/MOT</i>).....	20
2.5.5 Kestabilan dan Kelabilan Senyawa Kompleks.....	23
2.5.6 Termodinamika Senyawa Kompleks.....	24
2.6 Metode Kimia Komputasi	25
2.6.1 DFT (<i>Density Functional Theory</i>)	25
2.6.2 Semi Empiris.....	28
2.6.3 Mekanika Molekular	28
2.7 Basis Set.....	29
2.8 NWChem (<i>NorthWest Computational Chemistry</i>)	29
2.9 Avogadro.....	30
2.10 Jmol	30
BAB III METODE PENELITIAN	31
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	31
3.2 Perangkat Penelitian.....	31
3.2.1 Perangkat Keras	31
3.2.2 Perangkat Lunak.....	31
3.2.3 Subjek Penelitian.....	31
3.3 Prosedur penelitian.....	32
3.4 Desain Penelitian Kimia Komputasi	33
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	34
4.1 Hasil Penelitian.....	34

4.2 Perubahan Energi Pembentukan Senyawa Kompleks Fe(II)	34
4.2.1 Struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_2(\text{py})_4$	34
4.2.2 Struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_3(\text{py})_3$	37
4.2.3 Struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_4(\text{py})_2$	39
4.3 Stabilitas Senyawa Kompleks Berdasarkan Energi Total	41
4.4 Rumus Molekul yang Paling Sesuai.....	42
BAB V PENUTUP.....	44
5.1 Kesimpulan.....	44
5.2 Saran.....	44
DAFTAR PUSTAKA.....	45
LAMPIRAN.....	49