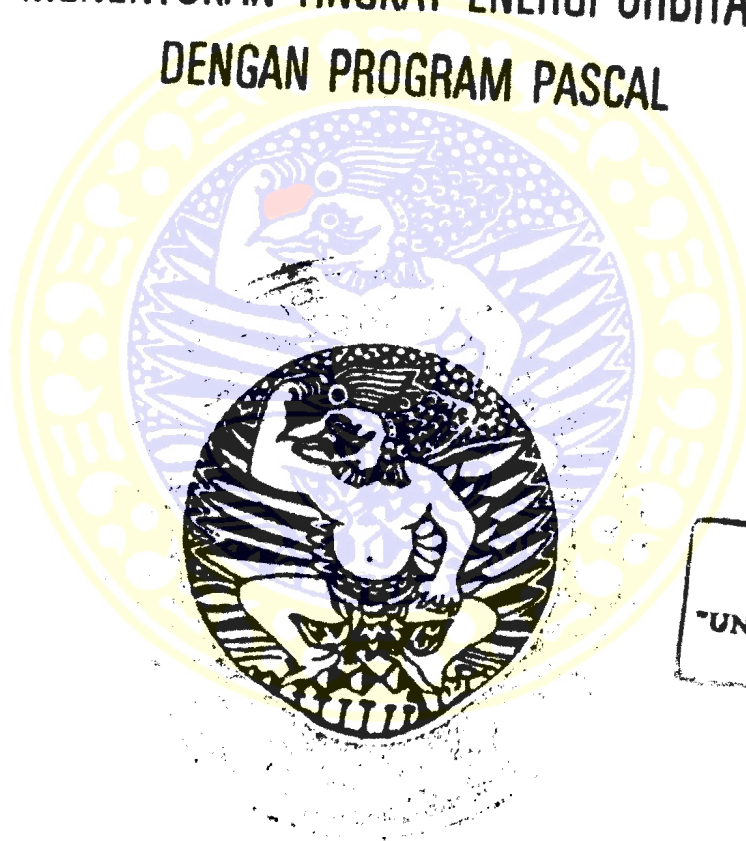


- HIDROKARBON
- KIMIA ORGANIK

SKRIPSI

APLIKASI METODE ORBITAL MOLEKUL HUCKEL
PADA HIDROKARBON TERKONJUGASI TAK TERSUBSTITUSI
UNTUK MENENTUKAN TINGKAT ENERGI ORBITAL MOLEKUL
DENGAN PROGRAM PASCAL



KK
MPK 09/97
Ban
a



KHODIYAH BANAZIAH

**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS AIRLANGGA
SURABAYA
1997**

**APLIKASI METODE ORBITAL MOLEKUL HUCKEL
PADA HIDROKARBON TERKONJUGASI TAK TERSUBSTITUSI
UNTUK MENENTUKAN TINGKAT ENERGI ORBITAL MOLEKUL
DENGAN PROGRAM PASCAL**

SKRIPSI

diajukan sebagai tugas akhir

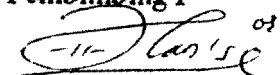
untuk memenuhi prasyarat mencapai gelar sarjana sains
bidang kimia pada FMIPA Universitas Airlangga Surabaya

Oleh

Khodijah Banazlah
089211004

Telah disetujui oleh:

Pembimbing I



Drs. Handoko D.K., Msc.
NIP : 131 801 399

Pembimbing II



Drs. Imam Siswanto
NIP : 132 049 437

**APLIKASI METODE ORBITAL MOLEKUL HUCKEL
PADA HIDROKARBON TERKONJUGASI TAK TERSUBSTITUSI
UNTUK MENENTUKAN TINGKAT ENERGI ORBITAL MOLEKUL
DENGAN PROGRAM PASCAL**



Skripsi

Oleh

Khodijah Banaziah
089211004

telah dinyatakan lulus ujian skripsi
pada tanggal :

Pembimbing I

Drs. Handoko D.K., Msc.
NIP : 131 801 399

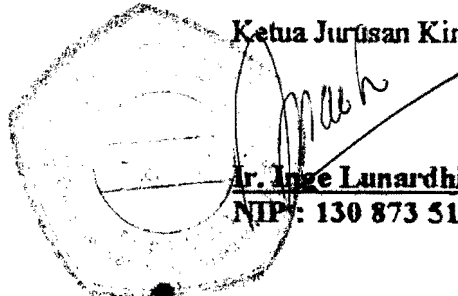
Pembimbing II

Drs. Imam Siswanto
NIP : 132 049 437

Dekan FMIPA UNAIR

Drs. Harjana, Msc.
NIP : 130 355 371

Ketua Jurusan Kimia



Dr. Inge Lunardi
NIP: 130 873 510

ABSTRAK

Penelitian aplikasi metode orbital molekul Huckel pada hidrokarbon terkonjugasi tak tersubstitusi dengan program komputer bertujuan mempermudah penentuan harga indeks reaksi. Aplikasi metode ini meliputi 4 tahap utama, yaitu (1) penentuan determinan sekuler Huckel, (2) penjabaran determinan, (3) penentuan akar-akar persamaan yang nantinya digunakan untuk menentukan tingkat Energi Orbital molekul dan (4) penentuan harga koefisien normalisasi yang dapat digunakan untuk menentukan persamaan gelombang dan harga indeks reaksi.

Pada tahap (2) untuk hidrokarbon terkonjugasi tak tersubstitusi alifatik menghasilkan suatu pola tertentu yaitu:

$$X^m - (m-1)X^{m-2} + \frac{(m-3)^2 + (m-3)X^{m-4} - (m-5)^3 + (m-5)^2 + 2(m-5)X^{m-6} + \dots + a_n X^{bn} = 0$$

dengan m ordo matrik bujursangkar dan harga a dan $b \geq 0$.

Tahap (3) dan (4) seharusnya dapat dibuat programnya, namun penyusun hanya dapat menyelesaikan sampai penentuan tingkat energi orbital molekul.