

ABSTRAK

Fahria salam, 2022. Studi Komputasi Kompleks 1,10-Fenontrolin Dengan Logam Fe, Cu, Co, Ni Dan Zn Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT). Dibimbing oleh Muliadi, dan Topan Setiawan

Penelitian kimia komputasi dilakukan untuk mengetahui pemodelan struktur kompleks 1,10-fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni, Zn menggunakan metode DFT dan untuk mengetahui aktivitas kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn pemodelan struktur telah dilakukan secara komputasi dengan menggunakan software *ChemDraW Ultra 12.0* dan GaussView dengan basis set B3LYP/6-31G. Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi adalah E_{HOMO} , E_{LUMO} , dengan energi total. Dari nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} yang diperoleh kemudian dihitung nilai energy Gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), hardness (η), dan softness (σ). Perhitungan secara komputasi secara kimia menunjukkan bahwa memodelkan struktur Kompleks 1,10 Fenontrolin menggunakan metode DFT (Density Finctional Theory) Nilai energi total untuk masing-masing Kompleks 1,10 Fenontralin adalah Fe-Phen :115.272 kcal/mol, Cu-Phen: 114.711 kcal/mol, Co-Phen: 119,192, kcal/mol Ni-Phen:113,641 kcal/mol:Zn-Phen : 123.99 kcal/mol.

Kata kunci: 1.10 Fenantrolin, Komputasi, DFT, E_{HOMO} , E_{LUMO} .

ABSTRACT

Fahria salamat, 2022. Computational Study of 1.10-Phenanthroline Complex with Fe, Cu, Co, Ni and Zn Metals Using Density Functional Theory (DFT) Method. Advisor Muliadi, and Topan Setiawan.

Computational chemistry research was carried out to determine the structural modeling of the 1.10-phenanthroline complex with Fe, Cu, Co, Ni, Zn using the DFT method and to determine the activity of the 1.10 phenanthroline complex with Fe, Cu, Co, Ni and Zn metals. Performed computationally using the ChemDraw Ultra 12.0 and Gaussian software with the base set B3LYP/6-31G. The parameters obtained from the optimization results are EHOMO, ELUMO, with total energy. From the obtained EHOMO and ELUMO values, the energy gap (ΔE), ionization potential (I), electron affinity (A), electronegativity (χ), hardness (η), and softness (σ) were calculated. Computational chemical calculations show that modeling the structure of the 1,10 phenanthroline complex using the DFT (Density Functional Theory) method. The total energy value for each 1,10 phenanthroline complex is Fe-Phen :115.272 kcal/mol, Cu-Phen: 114.711 kcal /mol, Co-Phen: 119.192, kcal/mol Ni-Phen:113.641 kcal/mol:Zn-Phen : 123.99 kcal/mol.

Keywords: 1.10 Phenanthroline, Computation, DFT, E_{HOMO} , E_{LUMO} .