

ABSTRAK

Nur MalaSari Duwila, 2022. Density Functional Theory Senyawa Kompleks Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} pirolidin-ditiokarbamat. Pembimbing Muliadi dan Muhammad Amin.

Pemodelan senyawa kompleks Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory. Aplikasi yang digunakan adalah Gaussian 09W dan GaussView 6.016. Fungsi yang digunakan adalah B3LYP dan basis set yang digunakan adalah LANL2DZ. Hasilnya menunjukkan nilai energi total untuk masing-masing jenis senyawa pirolidin-ditiokarbamat yaitu PDTC: 85,69 kcal/mol, $\text{Ni}(\text{PDTC})_2$: 175.631 kcal/mol, $\text{Zn}(\text{PDTC})_2$: 175.334 kcal/mol, $\text{Pt}(\text{PDTC})_2$: 175.524 kcal/mol. Data dari deskriptor elektronik adalah E_{HOMO} , E_{LUMO} , ΔEG (eV), Momen Dipol, dan Muatan Atom Bersih. Data tersebut menunjukkan bahwa energi yang paling optimal pada senyawa $\text{Zn}(\text{PDTC})_2$. Data ΔEG (eV) menunjukkan $\text{Zn}(\text{PDTC})_2$ memiliki molekul yang stabil dan reaktivitas yang rendah.

Kata Kunci: DFT, Pirolidin-Ditiokarbamat, Optimasi Geometri, Senyawa kompleks, Pemodelan Molekul

ABSTRACT

Nur MalaSari Duwila, 2022. Density Functional Theory of Ni^{2+} , Zn^{2+} , dan Pt^{2+} pyrrolidine-dithiocarbamate Compounds Complex. Supervisor Muliadi and Muhammad Amin.

Modeling compounds of complex Ni^{2+} , Zn^{2+} , and Pt^{2+} pyrrolidin-dithiocarbamate using Density Functional Theory method. The applications used are Gaussian 09W and GaussView 6.016. The function used is B3LYP and the base set used is LANL2DZ. The results show the total energy value for each type of pyrrolidin-dithiocarbamate compound, namely PDTC: 85.69 kcal/mol, $\text{Ni}(\text{PDTC})_2$: 175,631 kcal/mol, $\text{Zn}(\text{PDTC})_2$: 175,334 kcal/mol, $\text{Pt}(\text{PDTC})_2$: 175,524 kcal/mol. The data from the electronic descriptors are E_{HOMO} , E_{LUMO} , $\Delta\text{EG}(\text{eV})$, Dipole Moment, and Net Atomic Charge. These data indicate that the most optimal energy in the compound $\text{Zn}(\text{PDTC})_2$. EG (eV) data shows $\text{Zn}(\text{PDTC})_2$ has a stable molecule and low reactivity.

Keywords: DFT Method, Pyrrolidine-Dithiocarbamate, Geometry Optimization, Compounds Complex, Molecular Modeling