

ABSTRAK

Penemuan mekanika kuantum telah memberi pengaruh yang besar dalam ilmu kimia dengan munculnya kimia komputasi. Salah satu metode perhitungan yang digunakan dalam kimia komputasi yaitu *Density Functional Theory* (DFT). Metode DFT memberi penyelesaian persamaan Schrödinger secara sederhana karena didasarkan pada densitas elektron. Metode ini umum digunakan untuk menentukan optimasi geometri dan cukup cepat untuk menghitung molekul yang relatif besar seperti senyawa logam transisi. Dalam penelitian ini telah ditentukan optimasi geometri dan sifat-sifat energetik dari senyawa kompleks Co(II)-,Ni(II)-dibutilditiokarbamat dan Co(II)-,Ni(II)-dibutilditiofosfat. Sejauh ini kajian tentang geometri dan sifat energetik untuk senyawa ditiokarbamat dan ditiofosfat dengan alkil rantai panjang masih belum banyak dipelajari. Tujuan penelitian ini adalah menentukan geometri dan sifat-sifat energetik dari senyawa kompleks Co(II)-,Ni(II)-dibutilditiokarbamat dan Co(II)-,Ni(II)-dibutilditiofosfat dengan metode komputasi. Metode komputasi yang digunakan yaitu *Density Functional Theory* pada level B3LYP, B3PW91 dan BLYP. Basis set yang digunakan adalah LANL2DZ dan perangkat lunak Gaussian 03W. Dalam validasi metode, hasil perhitungan komputasi yang diperoleh tidak menunjukkan perbedaan yang signifikan dengan data pembandingan sehingga fungsi B3LYP, B3PW91 dan BLYP bisa digunakan untuk penentuan karakteristik ikatan dan sifat energetik dari kompleks yang dikaji. Hasil optimasi geometri dan analisis NBO menunjukkan bahwa Co(II)-,Ni(II)-dibutilditiokarbamat membentuk geometri persegi planar sedangkan Co(II)-,Ni(II)-dibutilditiofosfat bisa membentuk persegi planar dan tetrahedral. Hasil perhitungan energi relatif menunjukkan bahwa ligan dibutilditiokarbamat dan dibutilditiofosfat lebih stabil ketika berada dalam bentuk kompleks. Logam Co atau Ni dengan ligan dibutilditiokarbamat diduga lebih stabil dibandingkan dengan ligan dibutilditiofosfat.

Kata kunci : DFT, dibutilditiokarbamat, dibutilditiofosfat, senyawa kompleks, ligan.

ABSTRACT

The invention of quantum mechanic has a major influence in chemistry especially with the presence of computational chemistry. One of calculation method that used in computational chemistry is Density Functional Theory (DFT). DFT methods simplify complex solution of Schrödinger equation using electron density. This method is commonly used for geometry optimization and fast enough to calculate a relatively large molecules such as transition metal compounds. In this study the geometries and energetic properties of Co(II),Ni(II)-dibutyldithiocarbamat and Co(II)-,Ni(II)-dibutyldithiophosphat complex compounds will be studied. So far, the study of geometries and energetic properties of dithiocarbamate and dithiophosphat compounds with long alkyl chains are less studied. The purpose of this study is to determine the geometries and energetic properties of Co(II),Ni(II)-dibutyldithiocarbamat and Co(II)-,Ni(II)-dibutyldithiophosphat complex compounds with computational methods. Computational method used in this research is Density Functional Theory on B3LYP, B3PW91 and BLYP level. The basis set used is LANL2DZ as applied Gaussian 03W software. In validation, result of computational calculation do not show a significant difference with experiment data so that B3LYP, B3PW91 and BLYP function can be used to determine bond characterization and energetic properties of the complex. The result of geometry optimization and NBO analysis showed that Co(II),Ni(II)-dibutyldithiocarbamate structure is a square-planar whereas Co(II)-,Ni(II)-dibutyldithiophosphate can form square-planar and tetrahedral geometry. The relative energy showed that the complex dibutyldithiocarbamate and dibutyldithiophosphate ligand will be more stable. The Co, Ni metal with dibutyldithiocarbamate ligands is predicted more stable than dibutyldithiophosphate ligand.

Keyword : DFT, dibutyldithiocarbamate, dibutyldithiophosphate, complex compound, ligand.