

## STUDI INTERAKSI LOGAM TANAH JARANG La(III) DAN Y(III) DENGAN EKSTRAKTAN CAIRAN IONIK ASAM FENOKSIASETAT MENGUNAKAN METODE TEORI FUNGSI KERAPATAN

Herbi Yuliantoro  
14/365603/PA/16104

### INTISARI

Telah dilakukan kajian pengaruh substituen terhadap sifat ekstraktan dari kompleks  $[Y(III)(POA)(H_2O)_5]^{2+}$  tersubstitusi pada posisi *para* dengan menggunakan metode DFT. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari pengaruh substituen terhadap geometri dan sifat molekul kompleks yang dapat digunakan sebagai parameter reaktivitas dan kekuatan interaksi antara ekstraktan dengan logam. Parameter sifat ekstraktan yang dipelajari adalah  $E_g$  yaitu selisih energi HOMO-LUMO, nilai densitas elektron ( $\rho$ ), *Laplacian* ( $\nabla^2\rho$ ), dan energi elektronik ( $H(r)$ ). Optimasi geometri dilakukan menggunakan perangkat lunak *Gaussian 09* dengan metode B3LYP/6-31+G(d,p)/SDD. Perhitungan dilakukan terhadap struktur kompleks yang telah teroptimasi dengan program *Multiwfn* pada kondisi *bond critical point*.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa adanya substituen mempengaruhi nilai selisih HOMO-LUMO, nilai densitas elektron ( $\rho$ ), *Laplacian* ( $\nabla^2\rho$ ), energi elektronik ( $H(r)$ ) pada senyawa kompleks. Ekstraktan yang direkomendasikan untuk disintesis sebagai ekstraktan adalah ekstraktan dengan substituen  $-NH_2$ . Hal ini berdasarkan nilai dari parameter selisih energi HOMO-LUMO yang paling rendah yaitu 0,03882 eV dan nilai derajat ikatnya adalah -55,5508 kJ/mol. Interaksi antara logam dan ekstraktan dengan substituen  $-NH_2$  memiliki kekuatan yang tinggi dan lebih mudah terbentuk kompleks. Ekstraktan carian ionik asam fenoksiasetat akan berinteraksi lebih kuat dengan ion logam La(III) dengan nilai derajat ikat -294,378 kJ/mol dibandingkan ion logam Y(III) dengan nilai derajat ikatnya -53,949 kJ/mol.

Kata kunci: Logam tanah jarang, cairan ionik, ekstraksi, atom dalam molekul, DFT.

**INTERACTION STUDY OF RARE EARTH La(III) AND Y(III) WITH  
PHENOXYACETIC ACID IONIC LIQUID EXTRACTANT USING  
DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD**

Herbi Yuliantoro  
14/365603/PA/16104

**ABSTRACT**

The substantial influence of the substituent on the extractant properties of the complex  $[Y(III)(POA)(H_2O)_5]^{2+}$  is substituted on the para position by using the DFT method. The purpose of this study was to study the effect of substituents on complex geometry and the properties of complex molecules that can be used as parameters of reactivity and interaction strength between extractants and metals. The parameters of the extractant properties studied are Eg, HOMO-LUMO energy difference, the electron density ( $\rho$ ), Laplacian ( $\nabla^2\rho$ ), and the electronic energy density ( $H(r)$ ). Geometry optimization is done using Gaussian 09 software with B3LYP/6-31+G(d,p)/SDD method. The calculation is performed on a complex structure that has been optimized with Multiwfn program on bond critical point condition.

The results show that the presence of substituents influences the difference value of HOMO-LUMO, the value of electron density ( $\rho$ ), Laplacian ( $\nabla^2\rho$ ), the density of electronic energy ( $H(r)$ ) in the complex. The extractant recommended being synthesized as an extractant is an extractant with an  $-NH_2$  substituent. This is based on the value of the lowest HOMO-LUMO energy difference parameter of 0.03882 eV and the bond degree value is -55,5508 kJ/mol. The interaction between metals and extractants with  $-NH_2$  substituents has strong and there is more easily formed a complex. The ionic extract of phenoxyacetic acid will interact more strongly with La (III) metal ion with a bond degree value of -294.378 kJ/mol compared to the Y (III) metal ion with a bond degree value of -53.949 kJ/mol.

Keywords: Rare Earth, Ionic Liquid, Extraction, Atom in Molecule, DFT.