

STUDI INTERAKSI BERDASARKAN STRUKTUR, IKATAN DAN SIFAT-SIFAT ELEKTRONIK DUA ION LOGAM TANAH JARANG YTTRIUM(III) DAN SKANDIUM(III) DENGAN CAIRAN IONIK ASAM FENOKSIASETAT MENGGUNAKAN METODE TEORI FUNGSI KERAPATAN (DFT)

Pahlevy Waskithaning Nastiti
14/369052/PA/16347

INTISARI

Kajian kimia komputasi interaksi ion logam tanah jarang yttrium(III) dan skandium(III) dengan cairan ionik asam fenoksiasetat menggunakan metode teori fungsi kerapatan (DFT) untuk analisis struktur, ikatan dan sifat-sifat elektronik telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah mempelajari pengaruh substituen terhadap sifat kompleks dan selektivitas molekul n-oktil asam fenoksiasetat terhadap ion logam yttrium(III) dan skandium(III). Parameter yang digunakan dalam penelitian ini adalah selisih energi LUMO dan energi HOMO (ΔE_g), nilai densitas elektron (ρ), Laplacian ($\nabla^2\rho$), dan energi elektronik ($H(r)$).

Optimasi geometri dilakukan menggunakan perangkat lunak Gaussian 09W dengan metode B3LYP/GEN/CRENBL ECP. Nilai parameter ΔE_g diperoleh dari hasil optimasi geometri Gaussian 09W. Perhitungan parameter lain dilakukan terhadap struktur kompleks yang telah teroptimasi dengan program Multiwfn pada kondisi titik kritis ikatan (BCP).

Hasil dari penelitian ini menunjukkan bahwa substituen mempengaruhi nilai selisih energi LUMO dan energi HOMO (ΔE_g), nilai densitas elektron (ρ), Laplacian ($\nabla^2\rho$), dan energi elektronik ($H(r)$) pada molekul kompleks. Substituen OCH_3 direkomendasikan untuk disintesis sebagai substituen pada molekul asam fenoksiasetat. Rekomendasi ini dibuat berdasarkan nilai dari parameter ΔE_g dan derajat ikatan yang rendah yaitu 0,111 eV dan 142,179 kJ/mol. Molekul n-oktil asam fenoksiasetat berinteraksi lebih kuat dengan ion logam skandium(III) dengan nilai derajat ikat sebesar 10,252 kJ/mol dibandingkan dengan yttrium(III) sebesar 143,685 kJ/mol.

Kata kunci: logam tanah jarang, cairan ionik, pengaruh substituen, DFT

INTERACTION STUDY BASED ON THE STRUCTURE, BONDING, AND ELECTRONIC PROPERTIES OF TWO RARE EARTH METAL IONS YTTRIUM(III) AND SCANDIUM(III) WITH PHENOXYACETIC ACID IONIC LIQUID USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD

Pahlevy Waskithaning Nastiti
14/369052/PA/16347

ABSTRACT

Computational study of rare earth metal ion yttrium(III) and scandium(III) interaction with phenoxyacetic acid ionic liquid using DFT method to analyze structure, bond, and electronic properties had been performed. The aim of the study are to investigate the influence of substituents on complex properties and the selectivity of n-octyl phenoxyacetic acid on yttrium(III) and scandium(III) metal ions. Parameters calculations used in this study are gap energy of LUMO and HOMO (ΔE_g), electron density (ρ), Laplacian ($\nabla^2\rho$), and electronic energy ($H(r)$).

Geometry optimization was conducted using Gaussian 09W software with B3LYP/GEN/CRENBL ECP method. The value of the ΔE_g parameter is obtained from the result of the 09W Gaussian geometry optimization. Other parameters calculations are performed on complex optimized structures using Multiwfn program at bond critical point (BCP).

The results of this study indicate that substituents affecting the value of ΔE_g , electron density (ρ), Laplacian ($\nabla^2\rho$), and electronic energy ($H(r)$) in complex molecules. Methoxy (OCH_3) substituent is recommended for synthesis as substituent for phenoxyacetic acid molecule. This recommendation is based on the low values of the ΔE_g and the bond degree, which are 0.111 eV and 142.179 kJ/mol. N-octyl phenoxyacetic acid will interact more strongly with scandium(III) with binding degree value of 10.252 kJ/mol, compared to yttrium(III) by the binding degree value of 143.685 kJ/mol.

Keywords: Rare earth metals, ionic liquid, substituents effect, DFT