

INTISARI

STUDI INTERAKSI ION Fe^{2+} TERHADAP KOMPLEKS $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ DAN $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ MENGGUNAKAN METODE DFT-B3LYP DAN MP2

Lalu Hilman Hari Argiya
16/394134/PA/17225

Studi interaksi ion Fe^{2+} terhadap kompleks $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ dan $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ menggunakan metode DFT-B3LYP dan MP2 telah dilakukan. Tujuan penelitian ini adalah membandingkan reaktivitas ion Fe^{2+} serta pengaruhnya sebagai absorben terhadap kompleks $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ dan $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ yang terbentuk.

Penelitian ini diawali dengan optimasi kompleks $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ dan $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ menggunakan basis set def2-SVP pada level teori HF, B3LYP dan MP2. Selanjutnya dilakukan optimasi terhadap kompleks $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-Fe}$ dan $\text{CO}_2\text{-NH}_3\text{-Fe}$ menggunakan kombinasi basis set def2-SVP dan SBKJC-VDZ-ECP pada level teori yang sama. Proses optimasi dinyatakan konvergen apabila selisih gradien energi kurang dari 10^{-5} Hartree/Bohr. *Single Point Energy* (SPE) yang dihasilkan pada masing-masing kompleks dan penyusunnya digunakan untuk menghitung energi interaksi, kemudian distribusi nilai muatan atom Mulliken dan densitas elektron yang diperoleh divisualisasikan melalui peta potensial elektrostatik molekuler.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa kompleks $\text{CO}_2\text{-NH}_3\text{-Fe}$ yang terbentuk bersifat lebih stabil dibandingkan dengan kompleks $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-Fe}$, sehingga ion Fe^{2+} yang berinteraksi membentuk kompleks dengan NH_3 dapat mengurangi tingkat volatilitas dari NH_3 tersebut. Ion Fe^{2+} dalam pelarut amonia dapat berfungsi dengan sangat baik sebagai absorben untuk produk gas buang CO_2 , pasangan elektron bebas atom O yang terdapat pada molekul CO_2 akan menempati orbital d yang tidak terisi penuh pada ion Fe^{2+} .

Kata kunci: DFT-B3LYP, energi interaksi, kompleks, ion Fe^{2+} , MP2.

ABSTRACT

INTERACTION STUDY OF Fe^{2+} ION WITH $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ AND $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ COMPLEX USING DFT-B3LYP AND MP2 METHOD

Lalu Hilman Hari Argiya
16/394134/PA/17225

Interaction studies of Fe^{2+} ions with $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ complexes using the DFT-B3LYP and MP2 methods have been done. The purpose of this study was to compare the reactivity of Fe^{2+} ion and its effect as an absorbent to the formed of $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ complexes.

This research began with the optimization of $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{CO}_2\text{-NH}_3$ complexes using the def2-SVP basis set at the theoretical level of HF, B3LYP, and MP2. Furthermore, the $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-Fe}$ and $\text{CO}_2\text{-NH}_3\text{-Fe}$ complexes were performed using a combination of the basis set def2-SVP and SBKJC-VDZ-ECP at the same theoretical level. The optimization process was convergent if the energy gradient difference was less than 10^{-5} Hartree/Bohr. The Single Point Energy (SPE) generated in each complex was used to calculate the energy of the interaction, and then the distribution of the Mulliken atomic charge and electron density value obtained was visualized through a Molecular Electrostatic Potential (MEP) mapping.

The results showed that the $\text{CO}_2\text{-NH}_3\text{-Fe}$ complexes formed was more stable than the $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O-Fe}$ complexes, so the Fe^{2+} ion which interacted to form a complex with NH_3 could reduce the volatility level of NH_3 . Fe^{2+} ion in ammonia solution can be functionated very well as an absorbent for CO_2 exhaust gas products, the lone pair electron of the O atom contained in the CO_2 molecule will occupy the d orbital which is not filled in the Fe^{2+} ion.

Keywords: complex, DFT-B3LYP, Fe^{2+} ion, interaction energy, MP2