

INTISARI

Studi Interaksi Ion Zr(IV) dan Hf(IV) dengan Organofosfor Menggunakan Metode *Density Functional Theory* (DFT)

Oleh

Faruq Mubarak

09/283592/PA/12621

Studi interaksi antara ion logam Zr(IV) dan Hf(IV) dengan organofosfor menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) telah dilakukan pada penelitian ini. Metode DFT digunakan untuk menentukan senyawa organofosfor yang dapat berinteraksi lebih kuat dengan ion logam Zr(IV) dan Hf(IV), serta menentukan energi interaksi kompleks $MCl_4 \cdot 2(H_2O)$, $MCl_4 \cdot L(H_2O)$, dan $MCl_4 \cdot 2L$.

Zirkonium dan Hafnium yang diteliti adalah Zr dan Hf dalam bentuk tetravalen yang berikatan dengan 4 ion Cl^- dan berinteraksi dengan air dan organofosfor. Penelitian diawali dengan mengoptimasi senyawa organofosfor dan turunannya menggunakan metode DFT dengan himpunan basis Lanl2dz ECP. Penelitian selanjutnya adalah mengoptimasi kompleks ion Zr(IV) dan Hf(IV) dengan air dan organofosfor sebagai ligan. Struktur hasil optimasi digunakan untuk mempelajari interaksi antara logam dengan air, logam dengan organofosfor dan hubungan air dengan organofosfor. Energi interaksi didapat melalui perhitungan dari struktur hasil optimasi

Hasil perhitungan dengan metode DFT menunjukkan kompleks yang paling stabil adalah dalam bentuk $MCl_4 \cdot 2L$ dengan L adalah fosfin oksida. Energi interaksi kompleks $ZrCl_4 \cdot 2(O=PR'_3)$ sebesar -8679,86 kJ/mol. Jarak antara fosfin oksida dengan logam Zr adalah 2,03905 Å. Organofosfor berinteraksi lebih kuat dengan ion logam Zr(IV). Kompleks ion logam Zr(IV) lebih mudah terbentuk dibanding ion Hf(IV).

Kata kunci: ion Zr(IV), ion Hf(IV), Organofosfor, Interaksi ligan, DFT, Lanl2dz ECP

ABSTRACT

Interaction Study Of The Ion Zr(IV) and Hf(IV) with Organophosphorus using Density Functional Theory (DFT) Method

By

Faruq Mubarak
09/283592/PA/12621

The interaction study of ion Zr(VI) and Hf(IV) with organophosphorus using Densiti Functional Theory (DFT) has been carried out. DFT method was used to determine organophosphorus that could make strong interact with the metal Zr(IV) and Hf(IV), as well as determine the interaction energy from complex $MCl_4 \cdot 2(H_2O)$, $MCl_4 \cdot L(H_2O)$, and $MCl_4 \cdot 2L$.

Zirconium and Hafnium that has been studied were Zr and Hf in the form of tetravalent, bonded with 4 Cl⁻ and interact with water or organophosphorus. The structure of organophosphorus compounds and the derivatives were optimized using DFT method with basis set of Lanl2dz ECP. The complex ion Zr (IV) and Hf (IV) with water or organophosphorus as ligands were optimized. The optimized structure was used to determine the interaction between the metal with water, the metal with organophosphorus and the metal with relationship between water and organophosphorus. The interaction energy obtained through the calculation of structural optimization results.

The results of DFT method showed that the most stable complex was in the form of $MCl_4 \cdot 2L$ with L is phosphine oxides. $ZrCl_4 \cdot 2(O=PR'_3)$ complex interaction energy was -8679.86 kJ / mol. The distance between the phosphine oxides with Zr metal was 2.03905 Å. The interact organophosphorus with ion Zr(IV) more stronger than with ion Hf(IV). Metal complexes ion Zr(IV) was more easily formed than ion Hf(IV).

Keywords: ion Zr(IV), ion Hf(IV), Organophosphorus, Ligand interaction, DFT, Lanl2dz ECP