

ABSTRAK

Vivi Semari Malau, NIM 4203210023 (2025). KAJIAN KOMPUTASI PREDIKSI STRUKTUR SENYAWA KOMPLEKS Fe(II) DENGAN LIGAN TIOSIANAT (SCN^-) DAN PYRIDIN ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$) MENGGUNAKAN RHF (*RESTRICTED HARTREE FOCK*)

Bentuk geometri molekul senyawa kompleks tetrapyridinditiosianatobesi(II), $[\text{Fe}(\text{SCN})_2(\text{py})_4]$ yang masih bersifat rekayasa, sehingga diteliti lebih lanjut struktur senyawa kompleks yang stabil pada Fe(II) dengan ligan pyridin dan tiosianat dengan melihat perubahan energi pembentukan senyawa kompleks, senyawa kompleks yang lebih stabil dan rumus molekul yang paling sesuai berdasarkan perhitungan Komputasi menggunakan fungsi hybrid RHF dan basis set 6-31G, Optimasi geometri terhadap molekul dari NWChem versi 6.6 dan perangkat lunak Jmol versi 14.28.29. Besar energi dari hasil perhitungan komputasi dengan menggunakan RHF/6-31G untuk struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_2(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4$: -1524.86976182444 KJ/mol; struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_3(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_3$: -1557.98302881166 KJ/mol; dan struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_4(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2$: -2083.53616162888 KJ/mol. Perubahan energi pembentukan menunjukkan bahwa struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_4(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2$ adalah yang paling stabil. Rumus molekul yang paling sesuai untuk senyawa kompleks Fe(II) adalah $[\text{Fe}(\text{SCN})_4(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2]$.

Kata kunci: Fe, pyridin (py), tiosianat (SCN^-) senyawa kompleks, NWChem, kimia komputasi



ABSTRACT

Vivi Semari Malau , NIM 4203210023 (2025). COMPUTATIONAL STUDY OF STRUCTURE PREDICTION OF COMPLEX COMPOUND Fe(II) WITH PYRIDINE (C₅H₅N) AND THIOCYANATE (SCN⁻) LIGAND USING RHF (*RESTRICTED HARTREE FOCK*)

Form geometry molecule compound complex tetrapyridinedithiocyanateiron (II), [Fe(SCN)₂(py)₄] which is still nature engineering, so that investigated more carry on structure compound stable complex on Fe(II) with ligand pyridine And thiocyanate with see change energy formation compound complex , compound more complex stable And formula the most suitable molecule based on calculation Computing use RHF hybrid function and 6-31G basis set, Optimization geometry to molecule from NWChem version 6.6 and device soft Jmol version 14.28.29. Big energy from results calculation computing with using RHF/6-31G for structure of Fe(SCN)₂(C₅H₅N)₄: -1524.86976182444 KJ/ mol; structure Fe(SCN)₃(C₅H₅N)₃ : -1557.98302881166 KJ/ mol ; And structure Fe(SCN)₄ (C₅H₅N)₂: -2083.53616162888 KJ/mol. Change energy formation show that The structure of Fe(SCN)₄(C₅H₅N)₂ is the most stable. The formula the most suitable molecule For compound complex Fe(II) is [Fe(SCN)₄(C₅H₅N)₂].

Keywords : DFT, Fe, pyridine (py), thiocyanate (SCN⁻) compounds complex , NWChem , chemistry computation

THE
Character Building
UNIVERSITY