

Studi teoritis struktur dan spektrum elektronik kompleks lantanida terpyridine tersubstitusi gugus heterosiklik tak jenuh = Theoretical study of structure and electronic spectra of lanthanides complexes of unsaturated heterocyclic substituted terpyridine / Ely Setiawan

Ely Setiawan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20365216&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Studi teoritis struktur dan spektrum elektronik kompleks lantanida terpyridine tersubstitusi gugus heterosiklik tak jenuh cincin 5 yaitu pyrrole, furan dan thiophene telah dilakukan menggunakan metode Sparkle/RM1 untuk memperoleh geometri yang mendekati keadaan yang sebenarnya. Analisis energi, muatan parsial dan panjang ikatan dilakukan untuk memperoleh sifat strukturnya. Untuk mendapatkan spektrum elektronik, sparkle diganti dengan titik muatan dengan posisi ligan hasil optimasi geometri Sparkle/RM1, dengan menggunakan metode ZINDO/S. Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa metode Sparkle/RM1 dapat digunakan untuk memprediksi geometri ligan dan kompleks lantanida terpyridine tersubstitusi gugus heterosiklik tak jenuh. Hasil optimasi menunjukkan bahwa ion lantanida pada kompleks $[Ln(L)(NO_3)_3]$ memiliki bilangan koordinasi 9, yang berikatan dengan satu ligan tridentat L (terpyridine tersubstitusi gugus heterosiklik) dan tiga gugus nitrat sebagai ligan bidentat. Perhitungan frekuensi ligan dan kompleks lantanida terpyridine tersubstitusi gugus heterosiklik tak jenuh menghasilkan spektrum IR dengan cukup akurat. Analisis spektrum elektronik menghasilkan spektrum UV-Vis kompleks $[Ln(L)(NO_3)_3]$ memiliki serapan yang lebih tinggi dan memiliki serapan yang lebih besar dari spektrum UV-Vis ligan dalam keadaan bebas.

<hr>

ABSTRACT

Theoretical studies of structure and electronic spectra on lanthanides complexes of unsaturated five-membered heterocyclic rings substituted terpyridine has been conducted using the Sparkle/RM1 method. The structures optimized using Sparkle/RM1 method to obtain the most close structures with those in real experiments. Energy, partial charge and bond distance analysis have been done to predict the structure properties. For the calculation of the electronic spectra of the complexes, the sparkle is replaced by a point charge with ligand held in the positions as determined by Sparkle/RM1, and uses a ZINDO/S methods. The result of the calculation showed that free ligand and its lanthanides complexes could be predicted by Sparkle/RM1 methods. Optimized geometri showed that in the complex $[Ln(L)(NO_3)_3]$, lanthanide ion is 9-coordinate, being bonded to one tridentate L ligand (unsaturated heterocyclic substituted terpyridine) and three

bidentate nitrates. IR spectra from the frequency calculation of the ligand and its complexes has been obtained with a good accuracy. The calculation of the electronic/UV-Vis spectra of the complexes $[\text{Ln}(\text{L})(\text{NO}_3)_3]$ has more higher absorption and displaying a red shift than UV-Vis spectra of free ligand.