

THE INTERACTION OF Co^{2+} -AMMONIA MODELLING: THE COMPARATIVE STUDY BETWEEN *AB INITIO* AND ELECTRON CORRELATION METHODS

Pemodelan Interaksi Co^{2+} -Amoniak: Perbandingan antara Metode Ab Initio dan Korelasi Elektron

Harno Dwi Pranowo, Foliatini, Karna Wijaya
Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry
Gadjah Mada University, Yogyakarta

ABSTRACT

Research on comparison between Hartree-Fock method and electron correlation methods as well as the effect of size of basis sets on representing interaction of $\text{Co}^{2+}\text{NH}_3$ observed from complex energy parameters and optimum geometric parameters have been carried out. The first step is screening basis sets based on charge transfer effect and BSSE value. The selected basis set does not yield charge transfer at $1,4 \text{ \AA} < r_{\text{Co}^{2+}-\text{N}} < 8 \text{ \AA}$, and yield small BSSE value. Electron correlation methods used are Møller-Plesset order 2 (MP2), Møller-Plesset order 3 (MP3), Configuration Interaction, Doubles (CID), dan Configuration Interaction, Singles and Doubles (CISD) whereas the basis set used is the result of the screening. LANL2DZ ECP-6-31G* and LANL2DZ ECP-6-311++G(3df,3pd) basis sets are used with Unrestricted Hartree-Fock (UHF) and Møller-Plesset order 2 (MP2) methods to study the effect of size of basis sets. The result of the research showed that the best basis set is LANL2DZ ECP for Co^{2+} and 6-31G* for NH_3 . The application of electron correlation method and large basis set can increase the quality of interaction representation of $\text{Co}^{2+}-\text{NH}_3$. Møller-Plesset (MP) perturbation method gives larger contribution to correlation energy than Configuration Interaction (CI) method.

Keywords: solvation modelling, ammonia, cobalt

PENDAHULUAN

Kajian tentang solvasi ion dalam fasa cair sangat penting artinya untuk memahami sifat-sifat termodinamik dan kinetik serta struktur solvasi. Data yang diperoleh dari kajian tentang solvasi ion meliputi bilangan solvasi, energi interaksi antara ion dan molekul-molekul ligan, dan laju pertukaran ligan yang terkoordinasi di sekeliling ion [1].

Studi solvasi ion tersebut dapat dilakukan dengan dua jenis metode, yaitu metode eksperimen dan metode teoritis. Metode eksperimen yang banyak digunakan antara lain adalah spektroskopi dan difraksi, misalnya spektroskopi inframerah, spektroskopi Raman, spektroskopi hamburan cahaya, difraksi sinar X, difraksi neutron, dan difraksi elektron. Metode teoritis dilakukan dengan simulasi komputer yang dapat dikategorikan menjadi tiga jenis, yaitu : Dinamika Molekuler (*Molecular Dynamics*, MD) Monte Carlo (MC) dan Mekanika Molekuler (MM) [2].

Simulasi solvasi ion dalam suatu pelarut dapat dilakukan bila masing-masing potensial pasangan dari masing-masing interaksi antar

spesies telah diketahui yaitu interaksi antara ion-pelarut dan antar pelarut. Potensial pasangan dapat disusun atas dasar perhitungan kimia komputasi antara lain *ab initio*, semiempiris maupun mekanika molekular. Untuk mempelajari solvasi kation Co^{2+} dalam amoniak, potensial pasangan yang harus ditentukan adalah potensial pasangan $\text{Co}^{2+}-\text{NH}_3$ dan NH_3-NH_3 [3].

Langkah pertama dalam penyusunan potensial pasangan $\text{Co}^{2+}-\text{NH}_3$ atas dasar perhitungan *ab initio* adalah pemilihan himpunan basis yang sesuai dengan sistem yang dipelajari. Himpunan basis merupakan deskripsi matematis orbital dalam suatu molekul. Semakin besar ukuran himpunan basis semakin akurat dalam mendeskripsikan orbital [4].

Untuk atom-atom logam transisi, seperti kobalt, penggunaan himpunan basis ECP memiliki banyak keuntungan karena himpunan basis ini memasukkan perhitungan faktor relativitas dan mereduksi sejumlah integral sehingga membutuhkan waktu perhitungan yang lebih singkat [5].

Kualitas potensial pasangan sangat menentukan hasil deskripsi sifat-sifat dan struktur solvasi, sehingga perlu dipelajari faktor-faktor

yang berpengaruh terhadap kualitas potensial pasangan, antara lain ukuran himpunan basis dan metode korelasi elektron. Metode korelasi elektron yang banyak digunakan adalah metode perturbasi Møller-Plesset (*Møller-Plesset Perturbation Theory, MP*) dan metode interaksi konfigurasi (*Configuration Interaction, CI*) [6].

Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari penentuan himpunan basis yang baik untuk mengkonstruksi potensial pasangan yang berkualitas yang dapat mendeskripsikan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ pada jarak intermolekular yang dibutuhkan untuk kajian simulasi Monte Carlo terhadap sistem solvasi Co^{2+} dalam amoniak. Penelitian ini juga mempelajari pengaruh perhitungan korelasi elektron dengan metode perturbasi MP dan metode CI, serta pengaruh ukuran himpunan basis dalam perhitungan energi kompleks dan parameter optimum pada interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ dengan menggunakan metode UHF sebagai referensi.

METODOLOGI

Penelitian ini dibagi menjadi 2 tahap, yaitu : (1) Pemilihan himpunan basis yang baik untuk mendeskripsikan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$, dan (2) Membandingkan deskripsi interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ antara metode UHF dengan metode korelasi elektron dilihat dari parameter energi kompleks dan parameter geometri optimum yang meliputi jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$, sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$, jarak N-H , dan sudut H-N-H .

Pemilihan Himpunan basis

Parameter yang digunakan untuk menentukan himpunan basis yang baik adalah : perpindahan muatan (*charge transfer*) dan BSSE (*Basis Set Superposition Error*) [7].

Pemilihan himpunan basis dilakukan dengan kombinasi dari 5 himpunan basis Co^{2+} dan 10 himpunan basis untuk NH_3 sehingga didapatkan 50 kombinasi (tabel 1).

Geometri interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ diatur sedemikian hingga molekul NH_3 ditempatkan dengan atom N berada di pusat koordinat Cartesian, dan kation Co^{2+} berada pada arah momen dipol NH_3 . Jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ divariasikan dari 1,4 Å sampai 8 Å. Geometri NH_3 diambil dari data eksperimental dengan jarak $\text{N-H} = 1,0124$ Å dan sudut $\text{H-N-H} = 106,6801^\circ$ [8].

Langkah pertama dari pemilihan himpunan basis adalah mencari himpunan basis yang tidak menghasilkan perpindahan muatan pada jarak interaksi yang dipelajari, yaitu pada jarak 1,4 Å sampai 8 Å.

Langkah berikutnya adalah menghitung BSSE. Perhitungan BSSE dilakukan pada himpunan basis yang tidak menghasilkan perpindahan muatan. BSSE dihitung berdasar koreksi *counterpoise* yang dihitung sebagai beda energi antara energi yang dihitung secara SCF (*Self Consistent Field*), ΔE^{SCF} dengan energi yang dihitung secara *counterpoise*, ΔE^{CP} . Persamaan yang digunakan adalah [5]:

$$\Delta E^{\text{CP}} = E_{\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3}(r) - E_{\text{Co}^{2+}}^{(\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3)}(r) - E_{\text{NH}_3}^{(\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3)}(r)$$

$$\Delta E^{\text{SCF}} = E_{\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3}(r) - E_{\text{Co}^{2+}}(r) - E_{\text{NH}_3}(r)$$

$$\text{BSSE} = \Delta E^{\text{CP}} - \Delta E^{\text{SCF}}$$

$E_{\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3}(r)$, adalah energi interaksi ion Co^{2+} dengan amoniak, $E_{\text{Co}^{2+}}^{(\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3)}(r)$ adalah energi ion Co^{2+} yang dihitung dengan himpunan basis Co^{2+} dan amoniak (NH_3 sebagai *ghost*); $E_{\text{NH}_3}^{(\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3)}(r)$ adalah energi NH_3 yang dihitung dengan himpunan basis Co^{2+} dan amoniak (Co^{2+} sebagai *ghost*); $E_{\text{Co}^{2+}}(r)$ energi ion Co^{2+} yang dihitung hanya dengan himpunan basis Co^{2+} ; dan $E_{\text{NH}_3}(r)$ adalah energi NH_3 yang dihitung hanya dengan himpunan basis amoniak

B. Membandingkan deskripsi interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ antara metode UHF dengan metode korelasi elektron

Pada tahap ini digunakan himpunan basis yang diperoleh dari tahap A. Metode korelasi elektron yang digunakan adalah MP2 (*Møller-Plesset order 2*), MP3 (*Møller-Plesset order 3*), CI D (*Configuration Interaction, Doubles*) dan CISD (*Configuration Interaction, Singles and Doubles*) dengan UHF sebagai referensi. Geometri interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ pada tahap A digunakan dalam tahap B ini.

Tabel 1 Himpunan basis untuk Co^{2+} dan NH_3

Himpunan basis Co^{2+}	Himpunan basis NH_3
LANL2DZ ECP	STO-3G
	6-31G*
SBKJC VDZ ECP	6-31+G*
	DZP (Dunning)
Ahlrich VDZ	DZP+Diffuse(Dunning)
	SVP-(Dunning-Hay)
Stuttgart RSC ECP	SVP+Diffuse(Dunning-Hay)
	Ahlrich VDZ
Wachter + f	SBKJC VDZ ECP
	LANL2DZ ECP

Energi kompleks $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ dihitung dengan persamaan (2) dan dibuat grafik energi versus jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$. Untuk mempelajari pengaruh ukuran himpunan basis terhadap deskripsi interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$, digunakan kombinasi himpunan basis LANL2DZ ECP untuk Co^{2+} [9] dan (I) 6-31G*, (II) 6-311++G(3df,3pd) untuk NH_3 . Metode yang digunakan pada langkah ini yaitu UHF dan UMP2. Seluruh perhitungan energi dan parameter optimum dilakukan dengan menggunakan program Gaussian 98 [10].

HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

Pemilihan Himpunan basis

Setelah menjalankan seluruh perhitungan energi interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ dengan kombinasi himpunan basis (50 kombinasi), didapatkan 9 kombinasi himpunan basis yang tidak menghasilkan perpindahan muatan (tabel 2). Adanya perpindahan muatan ditunjukkan oleh berubahnya densitas spin atau jumlah elektron tak berpasangan pada Co dan N, dan berubahnya muatan Co dan N. Densitas spin dihitung dengan persamaan $2n+1$, n adalah hasil penjumlahan bilangan spin dari elektron tak berpasangan. Sebagai contoh, pada kombinasi himpunan basis SBKJC VDZ ECP-DZP pada jarak 8 Å, densitas spin Co = 4,0, muatan atom total Co = 0,999, densitas spin N = -1,113, muatan atom total N = -0,193. Hasil perhitungan ini menunjukkan bahwa kombinasi himpunan basis tersebut tidak dapat digunakan untuk mendeskripsikan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ karena yang terdeskripsikan bukan Co^{2+} tetapi Co^+ .

Tabel 3 menyajikan besarnya BSSE pada berbagai variasi himpunan basis. Perhitungan BSSE menghasilkan nilai yang kecil pada hampir semua kombinasi himpunan basis. BSSE hanya memiliki peranan signifikan pada jarak pendek. Pada jarak pendek terjadi tumpang-tindih antara himpunan basis-himpunan basis yang digunakan oleh masing-masing atom sehingga menimbulkan kesalahan dalam perhitungan yang hanya dilakukan dengan metode SCF. Makin jauh jarak interaksi, tumpang-tindih makin kecil dan pada jarak disosiasi tumpang-tindih dapat diabaikan. Dengan menggunakan persamaan (1), (2), dan (3) didapatkan fakta perhitungan bahwa ΔE^{CP} mendekati ΔE^{SCF} sehingga BSSE mendekati 0. Makin kecil BSSE makin baik himpunan basis tersebut dalam mengoreksi adanya tumpang-tindih antar himpunan basis. Hal ini berarti bahwa perhitungan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ dapat dilakukan dengan

Tabel 2 Himpunan basis yang tidak menghasilkan perpindahan muatan

Himpunan basis Co^{2+}	Himpunan basis NH_3
LANL2DZ ECP	STO-3G
LANL2DZ ECP	6-31G*
LANL2DZ ECP	SVP+Diffuse(Dunning-Hay)
LANL2DZ ECP	SBKJC VDZ ECP
LANL2DZ ECP	LANL2DZ ECP
SBKJC VDZ ECP	6-31G*
Ahlich VDZ	6-31+G*
Ahlich VDZ	Ahlich VDZ
Ahlich VDZ	LANL2DZ ECP

metode SCF tanpa harus melakukan perhitungan energi berdasar teknik *counterpoise* yang membutuhkan waktu perhitungan yang lebih lama.

Pemilihan himpunan basis juga berdasarkan parameter energi pada jarak kesetimbangan dan pada jarak yang besar (tabel 4). Dari hasil perhitungan didapatkan bahwa kombinasi himpunan basis LANL2DZ ECP dan 6-31G* merupakan himpunan basis paling baik dalam mendeskripsikan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ karena mempunyai ciri-ciri memiliki BSSE kecil, energi yang rendah pada jarak kesetimbangan, dan energi yang mendekati nol pada jarak yang jauh. Dengan demikian kombinasi himpunan basis ini yang akan digunakan dalam perhitungan berikutnya.

B. Deskripsi interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ berdasar metode *ab initio* dan metode korelasi elektron

1. Energi kompleks $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$

Dari grafik energi kompleks (gambar 1) terlihat bahwa metode UMP2 dan UMP3 memberikan penurunan energi terhadap metode UHF, dan metode UMP2 memberikan hasil yang lebih baik daripada metode UMP3.

Metode CID dan CISD juga menghasilkan energi yang lebih rendah relatif terhadap metode UHF tetapi tidak sebesar yang diperhitungkan oleh metode UMP2 dan UMP3. Hal ini dapat disebabkan oleh kelemahan utama dari metode CI yaitu metode ini tidak taat ukuran, artinya perhitungan energi untuk suatu sistem dengan n molekul tidak sama dengan n kali perhitungan molekul tersebut secara independen [11]. Dengan demikian untuk sistem yang makin besar, kontribusi terhadap korelasi elektron makin kecil. Untuk memberikan hasil yang lebih baik

dibutuhkan determinan eksitasi yang lebih tinggi (misalnya CISDT, CISDTQ) dan hal ini menuntut kemampuan perhitungan komputasi yang lebih

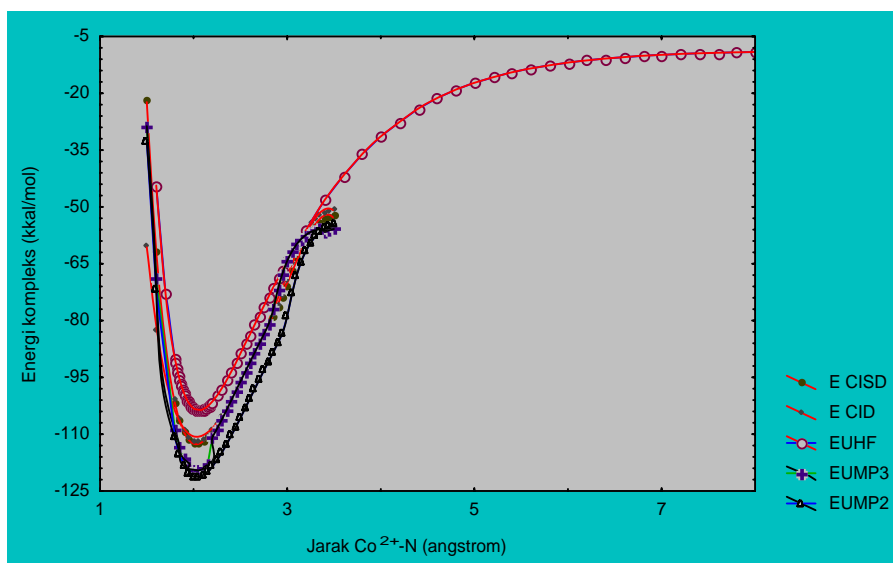
besar dan waktu yang relatif lebih lama, sehingga dari segi efisiensi, metode interaksi konfigurasi kurang tepat untuk dijadikan pilihan.

Tabel 3 Harga BSSE dari beberapa kombinasi himpunan basis

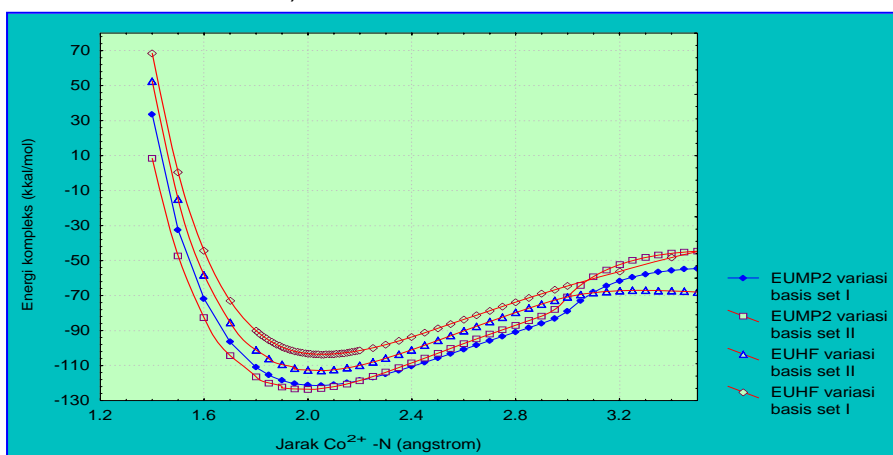
Jarak Co ²⁺ -N (Å)	BSSE (kkal/mol)								
	LANL2DZ/STO-3G	LANL2DZ/6-31G*	LANL2DZ/SVP+Diffuse	LANL2DZ/SBKJC	LANL2DZ/LANL2DZ	SBKJC/6-31G*	Ahlrich/6-31+G*	Ahlrich/Ahlrich	Ahlrich/LANL2DZ
1,40	3,871	4,601	31,424	3,965	2,969	4,285	2,405	3,194	2,019
1,50	3,305	4,351	30,884	3,383	2,641	3,985	2,005	2,886	1,782
2,00	2,319	3,149	29,217	2,356	1,588	2,935	1,012	2,313	0,914
2,50	1,499	2,310	24,486	1,537	1,174	2,074	0,557	1,441	0,455
3,00	0,591	1,267	16,982	0,538	0,476	1,414	0,275	0,830	0,129
3,50	0,298	1,017	10,368	0,173	0,166	1,131	0,175	0,589	0,063
4,00	0,258	0,822	6,677	0,152	0,092	0,990	0,133	0,399	0,044
4,50	0,216	0,617	4,863	0,139	0,051	0,737	0,108	0,284	0,053
5,00	0,168	0,471	3,618	0,112	0,025	0,470	0,102	0,207	0,084
5,50	0,131	0,358	2,493	0,090	0,017	0,259	0,110	0,161	0,144
6,00	0,098	0,254	1,536	0,071	0,014	0,122	0,138	0,157	0,131
6,50	0,069	0,163	0,846	0,053	0,011	0,049	0,011	0,017	0,006
7,00	0,044	0,095	0,420	0,035	0,009	0,017	0,007	0,009	0,006
7,50	0,025	0,050	0,189	0,021	0,007	0,006	0,007	0,008	0,008
8,00	0,013	0,024	0,078	0,012	0,005	0,003	0,009	0,009	0,010

Tabel 4 Energi kompleks dan BSSE untuk himpunan basis LANL2DZ ECP-6-31G*

Jarak Co ²⁺ -N (Å)	Energi kompleks (kkal/mol)	BSSE (kkal/mol)
1,4	74,797	4,601
1,5	5,291	4,351
2,0	-101,521	3,149
2,5	-88,073	2,310
3,0	-64,336	1,267
3,5	-44,736	1,017
4,0	-31,410	0,822
4,5	-22,592	0,617
5,0	-17,230	0,471
5,5	-13,935	0,358
6,0	-11,902	0,254
6,5	-10,617	0,163
7,0	-9,831	0,095
7,5	-9,386	0,050
8,0	-9,141	0,024



Gambar 1 Perbandingan energi kompleks interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ pada metode UHF dan metode korelasi elektron (UMP2, UMP3, CID dan CISD)



Gambar 2 Energi kompleks interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ dari perhitungan pada level UHF dan UMP2 dengan variasi himpunan basis I dan II untuk NH_3

Perbedaan kualitas deskripsi interaksi antara variasi himpunan basis I (LANL2DZ ECP untuk Co^{2+} dan 6-31G* untuk NH_3) dan himpunan basis II (LANL2DZ ECP untuk Co^{2+} dan 6-311++G(3df,3pd) untuk NH_3) ditentukan oleh kualitas himpunan basis pada molekul NH_3 karena untuk Co^{2+} digunakan himpunan basis yang sama. Himpunan basis 6-311++G(3df,3pd) mengandung fungsi yang lebih lengkap dan lebih mencukupi dalam mendeskripsikan molekul NH_3 sehingga memiliki akurasi yang lebih tinggi dalam memperhitungkan energi. Dengan penjelasan tersebut dapat dipahami bahwa variasi himpunan basis II dapat memberikan kualitas deskripsi interaksi yang lebih baik daripada yang direpresentasikan oleh variasi himpunan basis

I, hal ini ditunjukkan oleh nilai energi yang lebih rendah, yang terlihat pada gambar 2.

2. Jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ optimum

Metode *ab initio* memiliki kelemahan dalam mendeskripsikan suatu interaksi yaitu dalam memperhitungkan kontribusi ionik dan kontribusi kovalen [6]. Kedua kontribusi tersebut dianggap memiliki persentase yang sama dalam menjelaskan suatu ikatan. Pada jarak disosiasi untuk ikatan koordinasi, kontribusi ionik seharusnya lebih besar daripada kontribusi kovalen. Metode Hartree-Fock memprediksikan kedua kontribusi tersebut memiliki persentase yang sama sehingga kontribusi kovalen menjadi terlalu besar dari nilai sesungguhnya, dan jarak ikatan

menjadi lebih panjang dari jarak ikatan sesungguhnya. Hal ini dapat dilihat pada tabel perbandingan jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ optimum (tabel 5).

Penggunaan metode korelasi elektron meningkatkan kontribusi ionik pada interaksi tersebut sehingga efek tolakan antar ligan meningkat. Efek ini mengakibatkan jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ mengecil.

Dalam tabel 5 ditunjukkan bahwa jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ dengan menggunakan metode UMP2, UMP3, CID, dan CISD lebih pendek daripada penggunaan metode UHF. Dari hasil yang diperoleh tampak bahwa metode CID memprediksikan jarak terlalu besar dibanding UMP2 tapi koreksi lebih lanjut dengan metode CISD dapat memberikan hasil yang kualitasnya sebaik UMP2.

Penggunaan himpunan basis yang besar menyebabkan penurunan jarak $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$. Penggunaan metode korelasi elektron memberikan penurunan jarak terhadap UHF dan penggunaan himpunan basis yang lebih besar pada metode korelasi elektron memberikan penurunan jarak sampai pada jarak yang mendekati nilai eksak. Jarak yang diprediksikan oleh metode UMP2 pada variasi himpunan basis II adalah sebesar 1,9875 Å,

jauh lebih kecil daripada jarak yang diprediksikan oleh metode UHF dengan himpunan basis yang lebih kecil (variasi himpunan basis I).

3. Sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$

Selain berpengaruh pada jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$, penggunaan metode korelasi elektron dapat berpengaruh pada sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$ karena adanya tolakan antar ligan yang meningkat sehingga sudut H-N-H membesar dan mengakibatkan sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$ menjadi lebih kecil. Dari penelitian tampak bahwa penurunan sudut tampak jelas pada metode UMP2. Metode UMP3 memprediksikan sudut lebih besar daripada metode UHF, demikian juga metode CID. Metode CISD memberikan hasil dengan kualitas yang sama dengan metode UHF.

Meningkatnya ukuran himpunan basis mengakibatkan sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$ makin kecil, baik pada metode UHF maupun UMP2. Penambahan metode korelasi juga memberikan penurunan terhadap sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$. Pada penelitian ini didapatkan bahwa sudut yang diperhitungkan oleh metode UMP2 dengan variasi himpunan basis II lebih besar daripada yang diperhitungkan oleh metode UHF.

Tabel 5 Perbandingan parameter optimum antara metode UHF, UMP2, UMP3, CID dan CISD

Metode	Jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ (Å)	Sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$ (°)	Jarak N-H (Å)		Sudut H-N-H (°)	
			NH_3	$\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$	NH_3	$\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$
UHF	2,0520	113,8937	1,002811	1,017542	107,1410	104,7091
UMP2	2,0248	113,8280	1,016804	1,035044	106,5255	104,7845
UMP3	2,0260	113,9186	1,016899	1,032961	106,4041	104,6805
CID	2,0278	113,9477	1,016265	1,031035	106,4073	104,6471
CISD	2,0245	113,8915	1,016866	1,031531	106,3440	104,7116

Tabel 6 Perbandingan parameter optimum antara metode UHF dan UMP2 pada kombinasi himpunan basis I dan II untuk NH_3

Parameter	Himpunan basis untuk NH_3			
	6-31G*		6-311++G(3df,3pd)	
	UHF	UMP2	UHF	UMP2
Jarak $\text{Co}^{2+}\text{-N}$ (Å)	2,0520	2,0248	2,0413	1,9875
Sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}$ (°)	113,8937	113,8280	113,1840	113,6493
Jarak N-H (Å) pada NH_3	1,002811	1,016804	0,998750	1,011882
Jarak N-H (Å) pada $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$	1,017542	1,035044	1,012608	1,026999
Sudut H-N-H (°) pada NH_3	107,1410	106,5255	107,9916	106,6957
Sudut H-N-H (°) pada $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$	104,7091	104,7845	105,5243	105,0310

Hasil penelitian menunjukkan bahwa sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}_1$ sama dengan sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}_2$ dan sama dengan sudut $\text{Co}^{2+}\text{-N-H}_3$ untuk semua metode yang digunakan. Hal ini berarti bahwa orientasi molekul NH_3 terhadap kation Co^{2+} dapat digambarkan dengan adanya elektron tidak berpasangan pada atom N mengarah pada kation Co^{2+} dan ketiga atom H menjauhi kation Co^{2+} dengan tolakan yang sama.

4. Panjang ikatan N-H dan sudut ikatan H-N-H

Perhitungan menggunakan metode UHF menghasilkan sudut H-N-H sebesar $107,14^\circ$, terlalu besar dibandingkan dengan harga eksperimen yang besarnya $106,68^\circ$. Penggunaan metode korelasi elektron meningkatkan tolakan pasangan elektron menyendiri pada atom N terhadap pasangan elektron ikatan pada atom H, sehingga memberikan sudut ikatan H-N-H yang lebih kecil daripada yang diperhitungkan oleh metode UHF. Dari keempat metode korelasi elektron yang dipelajari, metode UMP2 memberikan nilai yang paling mendekati harga eksperimen. Metode UMP3, CID, dan CISD memperhitungkan tolakan pasangan elektron menyendiri lebih besar daripada tolakan yang diperhitungkan metode UMP2 sehingga sudut ikatan H-N-H yang dihasilkan lebih kecil, tapi justru semakin menjauhi harga eksperimen.

Pengaruh ukuran himpunan basis terlihat pada tabel 6. Meningkatnya ukuran himpunan basis menyebabkan membesarnya sudut H-N-H. Pada himpunan basis yang besar sudut H-N-H menjadi terlalu besar dibanding harga eksperimen. Penambahan metode korelasi elektron menurunkan besarnya sudut sampai pada nilai yang mendekati nilai eksperimen.

Fungsi gelombang UHF terlalu ionik sehingga panjang ikatan N-H terlalu kecil [6]. Penggunaan metode korelasi elektron meningkatkan kontribusi kovalen sehingga panjang ikatan yang diprediksikan makin besar. Meningkatnya ukuran himpunan basis mengakibatkan menurunnya panjang ikatan. Metode UHF dengan himpunan basis besar memprediksikan panjang ikatan terlalu kecil, dan koreksi dengan penggunaan metode korelasi elektron pada ukuran himpunan basis yang besar dapat memberikan panjang ikatan mendekati harga eksperimen.

KESIMPULAN

1. Kombinasi himpunan basis LANL2DZ ECP - 6-31G* merupakan himpunan basis yang paling baik dalam menjelaskan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$.
2. Penggunaan metode korelasi elektron UMP2, UMP3, CID, dan CISD dan ukuran himpunan

basis yang besar dapat memberikan peningkatan kualitas deskripsi interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$, tetapi metode perturbasi Møller-Plesset dapat memberikan hasil yang lebih baik daripada metode interaksi konfigurasi.

3. Meskipun metode korelasi elektron dapat menjelaskan interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$ dengan baik pada jarak optimum, tapi untuk mendapatkan deskripsi interaksi yang baik sampai pada jarak yang besar lebih baik digunakan metode UHF, karena metode UHF dapat menjelaskan secara baik untuk seluruh geometri interaksi $\text{Co}^{2+}\text{-NH}_3$.

DAFTAR PUSTAKA

1. Ohtaki, H., Radnai, T., 1993, *Chem. Rev.*, 93, 1165.
2. Allen M. P., Tildesley D. J., 1987, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, Oxford, UK.
3. Nielson G. W., 1991, *Z Naturforsch*, 46 a, 100.
4. Foresman, J.B., Frisch, A., 1996, *Exploring Chemistry with Electronics Structure Methods*, 2nd edition, Gaussian, Inc., Pittsburg, PA., 97.
5. Curtiss L. A., Halley J. W., Hautmann J., Rahman A., 1990, *J. Chem. Phys.*, 86, 2319
6. Jensen, F., 1999, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 265-267.
7. Cundari, T.R., Benson, M.T., Lutz, M.L., Sommerer, S.O., 1996, *Effective Core Potential Approaches to the Chemistry of the Heavier Elements, in Reviews in Computational Chemistry*, Boyd, D.B., Lipkowitz, K.B., Volume 8, VCH Publishers Inc., New York, 151.
8. Bueker, H.H., Uggerud, E., 1995, *J. Phys. Chem.*, 99, 5945-5949.
9. Hay, P.J. dan Wadt, W.R., 1985, *J. Chem. Phys.*, 82, 270.
10. Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel., Gill, P. M. W., Johnson, B. G., Robb, M. A., Cheesman, J. R., Keith, T. A., Petersson, G. A., Montgomery, J. A., Raghavachari, K., Al-Laham, M. A., Zakrzewski, V. G., Ortiz, J. V., Foresman, J. B., Cioslowski, J., Stefanov, B. B., Nayakkara, a., Challacombe, M., Peng, C. y., Ayala, P. L., Chen, W., Wong, M. W., Andres, J. L., Replogle, E. S., Gomperts, R., Martin, R. L., Fox, D. L., Binkley, J. S., defrees, D. J., Baker, J., Stewart, J. J. P., Head-Gordon, M., Gonzales, C. and Pople, J. a., 1995, *GAUSSIAN 98, Gaussian Inc., Piittsburgh*
11. Hehre, W.J., Radom, L., Schleyer, P.v.R., Pople, J.A., 1986, *Ab Initio Molecular Orbital Theory*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 33.