

LAPORAN PENELITIAN MANDIRI



JUDUL

STUDI KOMPUTASI NITROBENZENA DAN TURUNANNYA MENGGUNAKAN
TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN

PENGUSUL

Ketua : Mirella F. Maahury / NIDN: 0016058908
Anggota : Matthew Adi Honey Amos / NIDN: -

JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS PATTIMURA

2022

LEMBARAN PENGESAHAN

Judul : "Studi Komputasi Nitrobenzena dan Turunannya menggunakan Teori Fungsional Kerapatan"

Peneliti/Pelaksana
Nama Lengkap : Mirella Fonda Maahury, S.Si., M.Si
Perguruan Tinggi : Universitas Pattimura
NIDN : 0016058908
Program Studi : Kimia
Nomor HP : 085343009933
ID SINTA : 6737932
h-index : 3
Alamat surel (email) : fndmirella@gmail.com
Anggota (l)
Nama Lengkap : Matthew Adi Honey Amos
NIDN : -
Perguruan Tinggi : Universitas Pattimura

Biaya Keseluruhan : Rp. 5.000.000,-

Ambon, 14 November 2022

Mengetahui,
Dekan FMIPA Unpatti



Prof. Dr. P. Kakisina, S.Pd., M.Si
NIP. 197003101999031002



Ketua



Mirella Fonda Maahury, S.Si., M.Si
NIP. 196805201997031001

Menyetujui,
Ketua PPM Unpatti



Prof. Dr. Melvius Salakoty, M.Kes
NIP. 196112061988031002



RINGKASAN

Nitrobenzena merupakan salah satu turunan benzena. Nitrobenzena dapat ditemukan secara alami dan juga dari proses sintesis. Nitrobenzena digunakan sebagai bahan baku untuk mensintesis anilin, pewarna tekstil, pestisida, obat-obatan, dan sebagai pelarut dalam industri cat. Perhitungan komputasi dilakukan untuk nitrobenzena dan turunannya. Lima turunan nitrobenzena telah dioptimalkan menggunakan teori fungsi densitas (DFT) dengan fungsional B3LYP dan 3-21G(d) sebagai basis set. Struktur akhir dari optimasi geometri nitrobenzena dan turunannya berada dalam satu bidang (planar). Ada perbedaan nilai muatan, parameter struktural antara nitrobenzena dan turunannya. Perhitungan komputasi dapat memberikan hasil perbedaan antara nitrobenzena dan turunannya dalam parameter struktural dan sifat elektronik.

Kata Kunci: Nitrobenzena, DFT, Muatan atom, Sifat Elektronik