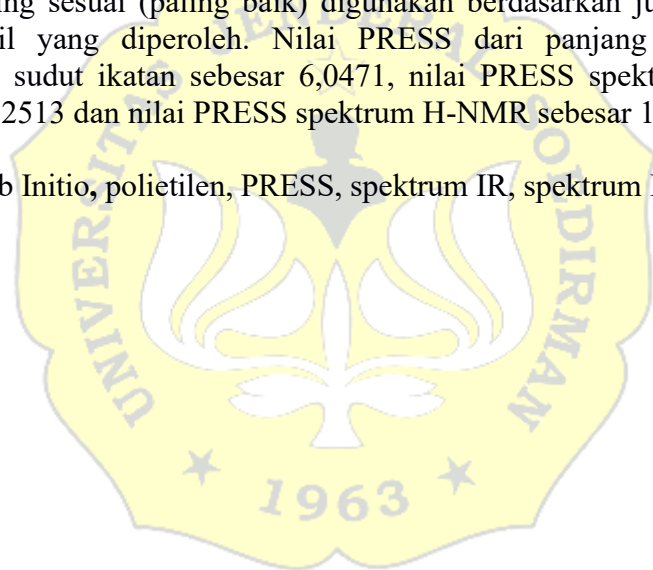


ABSTRAK

Kimia komputasi merupakan alat penting dalam mendukung pemahaman struktur dan sifat molekul secara teoritis. Pemilihan metode perhitungan dan himpunan basis yang tepat termasuk elemen krusial untuk memperoleh hasil simulasi molekuler yang akurat melalui pendekatan *Ab Initio* yang berbasis prinsip mekanika kuantum. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi pengaruh variasi himpunan basis terhadap hasil simulasi molekul polietilen tetramer. Enam himpunan basis yang digunakan adalah 6-31G*, 6-31G**, 6-31++G**, 6-311+G*, 6-311++G** dan cc-pVDZ. Pemodelan dilakukan dalam fase gas menggunakan perangkat lunak HyperChem dan mencakup analisis terhadap empat parameter utama, yakni total energi, momen dipol, parameter geometri berupa panjang ikatan dan sudut ikatan, spektrum inframerah (IR) dan spektrum *nuclear magnetic resonance* (H-NMR). Validasi dilakukan dengan menghitung nilai *Predicted Residual of Sum Squares* (PRESS) antara data teoritis dan data eksperimen. Hasil penelitian menunjukkan bahwa himpunan basis 6-311++G** merupakan himpunan basis yang paling sesuai (paling baik) digunakan berdasarkan jumlah total nilai PRESS terkecil yang diperoleh. Nilai PRESS dari panjang ikatan sebesar 0,0007861 dan sudut ikatan sebesar 6,0471, nilai PRESS spektrum inframerah sebesar 7.6110,2513 dan nilai PRESS spektrum H-NMR sebesar 1,546474.

Kata kunci: *Ab Initio*, polietilen, PRESS, spektrum IR, spektrum H-NMR



ABSTRACT

Computational chemistry is an important tool in supporting the theoretical understanding of molecular structure and properties. The selection of appropriate calculation methods and basis sets is a crucial element in obtaining accurate molecular simulation results through an ab initio approach based on quantum mechanics principles. This study aims to evaluate the influence of basis set variations on the simulation results of polyethylene tetramer molecules. The six basis sets used were 6-31G, 6-31G**, 6-31++G**, 6-311+G*, 6-311++G**, and cc-pVDZ. Modeling was performed in the gas phase using HyperChem software and included analysis of four main parameters: total energy, dipole moment, geometric parameters such as bond length and bond angle, infrared (IR) spectrum, and nuclear magnetic resonance (H-NMR) spectrum. Validation was performed by calculating the Predicted Residual of Sum Squares (PRESS) between theoretical and experimental data. The results of the study indicated that the 6-311++G** basis set was the most suitable (best) basis set to use based on the smallest total PRESS value obtained. The PRESS value for bond lengths was 0.0007861 and bond angles was 6.0471, the PRESS value for infrared spectra was 76110.2513, and the PRESS value for H-NMR spectra was 1.546474.*

Keywords: *Ab Initio, polyethylene, PRESS, IR spectrum, H-NMR spectrum,*

