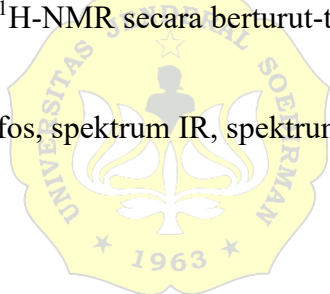


ABSTRAK

Kimia komputasi membantu kerja eksperimen untuk memahami dan memprediksi berbagai perilaku kimia, fisika, dan biologi. Penentuan metode dengan menggunakan himpunan basis dan *exchange-correlation* merupakan tahapan penting untuk mendapatkan simulasi molekular struktur yang stabil mendekati sebenarnya. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan metode yang sesuai yang dapat digunakan dalam pengembangan senyawa insektisida *chlorpyrifos*. Penelitian dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak *HyperChem* dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) yang menggunakan empat himpunan basis 6-31G*, 6-31G**, 6-311G' dan 6-311G** serta menggunakan *exchange-correlation hybrid* B3LYP, B3-PW91, EDF1, dan Becke97. Parameter yang digunakan dalam penelitian ini yaitu analisis spektrum Inframerah (IR), pergeseran kimia $^1\text{H-NMR}$, panjang ikatan antar atom dan sudut ikatan antar atom. Hasil penelitian menunjukkan metode DFT yang paling sesuai untuk senyawa *chlorpyrifos* yaitu himpunan basis 6-311G**/ B3LYP. Hal ini ditunjukkan oleh nilai PRESS yang dihasilkan berdasarkan beberapa parameter perhitungan bernilai paling kecil sebesar 50.639,1387. Penelitian juga menunjukkan hasil masing-masing nilai PRESS untuk parameter perhitungan panjang ikatan, sudut ikatan, spektrum IR, dan spektrum $^1\text{H-NMR}$ secara berturut-turut yaitu 0,0881; 111,7624; 50.525,7002; dan 1,5880.

Kata Kunci: DFT, klorpirifos, spektrum IR, spektrum $^1\text{H-NMR}$, PRESS



ABSTRACT

Computational chemistry assists experimental work in understanding and predicting various chemical, physical, and biological behaviors. Determining methods using basis sets and exchange-correlation is an important step in obtaining stable molecular simulations that are close to reality. This study aims to determine the appropriate method that can be used in the development of the insecticide compound chlorpyrifos. The research was conducted using HyperChem software with the Density Functional Theory (DFT) method, which used four basis sets, namely 6-31G, 6-31G**, 6-311G, and 6-311G**, as well as exchange-correlation hybrids B3LYP, B3-PW91, EDF1, and Becke97. The parameters used in this study were infrared (IR) spectrum analysis, ¹H-NMR chemical shift, interatomic bond length, and interatomic bond angle. The results of the study show that the most suitable DFT method for chlorpyrifos compounds is the 6-311G**/B3LYP basis set. This is indicated by the PRESS value produced based on several calculation parameters with the smallest value of 50,639.1387. The study also shows the results of each PRESS value for the calculation parameters of bond length, bond angle, IR spectrum, and ¹H-NMR spectrum, respectively, which are 0.0881; 111.7624; 50.525.7002; and 1.5880.*

Keywords: DFT, chlorpyrifos, IR spectrum, ¹H-NMR spectrum, PRESS

