

Rachman A.D.S., 2011, Pengaruh Basis Set Terhadap Energi Interaksi, Charge Transfer, Dan Basis Set Supersition Error dari Ion Ni²⁺ Dan Ion Br⁻ Menggunakan Metode HF dengan Software Gaussian03W. Skripsi ini di bawah bimbingan Drs. Faidur Rochman, MS, dan Mochamad Zakki Fahmi, S.Si, M.Si, Departemen Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya

ABSTRAK

Pengaruh basis set terhadap energi interaksi, *charge transfer*, dan *Basis Set Supersition Error* (BSSE) dapat dikerjakan menggunakan metode HF dengan *software Gaussian03W*. Pengaruh basis set sangat penting dalam suatu pemodelan pada komputasi senyawa Ni-Br. Perbedaan penggunaan basis set suatu unsur atau molekul dapat mempengaruhi hasil yang didapat. Untuk itulah penggunaan basis set yang paling sesuai akan memberikan hasil yang paling optimum. Penelitian dilakukan melalui pendekatan *ab initio* pada tingkat UHF dan RHF. Untuk mendapatkan basis set yang baik terdapat 3 macam seleksi yang harus dilakukan, yaitu seleksi energi interaksi, *charge transfer*, dan *Basis Set Supersition Error* (BSSE).

Pada penelitian ini, basis set memberikan hasil yang buruk terhadap energi interaksi, *charge transfer*, dan *Basis Set Supersition Error* (BSSE). Energi interaksi yang didapat kurang mendekati nol dan kurang sesuai dengan kurva Lennard Jones. *Charge transfer* masih terjadi pada setiap basis set. *Basis Set Supersition Error* (BSSE) memberikan pola yang buruk. Pasangan basis set terbaik untuk ion Ni²⁺ dan Br⁻ menggunakan Metode HF dengan *software Gaussian03W* tidak ditemukan pada penelitian ini.

Kata kunci : *Basis Set, Ni²⁺, Br⁻, Gaussian03W, ab initio, HF, UHF, RHF, energi interaksi, charge transfer, Basis Set Supersition Error (BSSE)*