

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Logam-logam yang bernilai ekonomi sangat tinggi, diantaranya emas, perak, platina, dan paladium, dikenal sebagai logam-logam yang berharga. Masing-masing logam ini memiliki ciri khas dan kekuatan dasar yang berbeda. Platina tidak kalah hebatnya dari emas dan perak, sangat berguna bagi pertumbuhan industri seperti dalam bidang otomotif digunakan sebagai elektroda dan katalis (catalytic converter), bidang kedokteran juga memanfaatkan sifat platina yang tergolong logam mulia ini mudah ditempa, termasuk kedokteran gigi. Seperti emas dan perak, platina juga berguna untuk investasi menunjukkan suatu kekayaan. Karena jenis penggunaannya yang banyak mengakibatkan sangat penting untuk dipelajari khusus dalam hal pengembangan metode pemurnian logam tersebut. Banyak metode pemurnian logam terutama yang berasal dari sampel alam. Pemurnian logam yang dapat kita lakukan seperti pemurnian logam dengan metode metalurgi yang terdiri dari : pemekatan, ekstraksi, pirometalurgi, elektrometalurgi, hidrometalurgi, selain itu ada juga pemurnian logam lain seperti pembentukan senyawa kompleks dari logam tersebut (Anonim, 2012).

Kajian tentang senyawa kompleks biasanya sangat terkait dengan berbagai aktivitas uji coba di laboratorium untuk menentukan berbagai jenis ligan yang paling tepat dalam pembentukan senyawa kompleks. Salah satu metode yang dapat dikembangkan adalah melakukan prediksi terhadap karakteristik senyawa kompleks tersebut.

Senyawa kompleks merupakan senyawa yang terbentuk dari ion logam dan ligan. Dalam proses pembentukannya ion logam merupakan penerima pasangan elektron (asam lewis) yang diberikan ligan yang berperan sebagai donor pasangan elektron (basa lewis). Ion logam yang terlibat dalam pembentukan senyawa kompleks umumnya merupakan logam transisi. Sedangkan ligannya bisa merupakan ion tunggal diantaranya Cl^- dan F^- ; ion poliatomik seperti : NO_3^- , NH_4^+ serta dapat berupa senyawa netral seperti NH_3 dan H_2O . Seperti telah

dikemukakan sebelumnya bahwa ligan berperan untuk memberikan pasangan elektron kepada atom pusat, ikatan yang terbentuk adalah ikatan kovalen koordinasi (Cotton & Wilkinson, 1989).

Sesuai dengan prinsip ketidakpastian Heisenberg adalah tidak mungkin secara simultan mengetahui momentum dan posisi secara pasti suatu partikel seperti elektron. Akibat partikel itu sangat kecil masa dan ukurannya, dicoba untuk menempatkan elektron dengan menyelidiki melalui perubahan posisi dan momentum. Sekarang ini dikenal dengan probability menemukan elektron dalam suatu ruang. Mekanika kuantum menggunakan persamaan gelombang untuk memprediksi daerah dengan probabilitas tinggi yang disebut orbital untuk membedakannya dengan orbit pada model Bohr (Suyanti, 2008)

Senyawa kompleks selalu dikaitkan dengan sintesis senyawa di laboratorium. Pada saat ini penelitian tentang senyawa kompleks telah banyak dilakukan diantaranya sintesis, dan karakterisasi senyawa kompleks $\text{Co}(\text{Bpy})^{2+}$ dan $\text{Co}(\text{Phen})^{2+}$, $\text{Cu}(\text{Bpy})^{2+}$ yang dilakukan oleh Sukro (2003), Selain itu Bruckner (2004) telah meneliti kompleks dari perak (II) dan (III) Prophyrin, Corroles dan Carbaporphyrin serta Nuraini (2011) telah meneliti kompleks perak dengan berbagai ligan. Dan akan dilakukan sintesis senyawa kompleks dari Platina dengan ligan-ligan : Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilendiamin (en), Pyridin (Pyr) dan Dietiltriamin (dien) menggunakan simulasi komputer dengan program NWChem 6,2. Dasar teori dari program aplikasi komputer ini adalah mekanika kuantum.

Dalam pelaksanaannya diawali penentuan karakteristik logam dan ligan-ligan yang akan dianalisa yaitu : Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilendiamin (en), Pyridin (Pyr) dan Dietiltriamin (dien). Kemudian ditentukan stabilitas/energi unsur, ligan dan berbagai keadaan transisi yang mungkin terbentuk dalam pembentukan senyawa kompleks. Dan pada akhirnya menentukan perubahan entalpi (ΔH) dari pembentukan senyawa kompleks yang terbentuk sehingga mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks tersebut dapat diketahui.

Perubahan entalpi pada pembentukan 1 mol zat langsung dari unsur-unsurnya disebut entalpi molar pembentukan atau entalpi pembentukan. Jika

pengukuran dilakukan pada keadaan standar (298° K, 1 atm) dan semua unsur-unsurnya dalam bentuk standar, maka perubahan entalpinya disebut entalpi pembentukan standar (ΔH_f°). Entalpi pembentukan dinyatakan dalam kJ per mol (kJ mol⁻¹) (Nugraha, 2010).

Perhitungan kimia kuantum dengan aplikasi dari kimia komputasi ini sangat membantu karena menghemat waktu dan tenaga jika dilakukan secara manual. Berdasarkan keterangan dan konsep di atas, penulis ingin melakukan penelitian dengan mengembangkan sebuah metode sintesis senyawa kompleks dalam hal ini menggunakan logam platina dengan berbagai ligan, maka dalam hal ini tertarik untuk memilih judul **“Penentuan Perubahan Entalpi (ΔH) Pada Proses Pembentukan Senyawa Kompleks Antara Logam Platina Dengan Ligan NH₃, Cl⁻, Pyr, en, Dan dien Menggunakan Program NWChem 6,2.”**

1.2. Identifikasi Masalah

1. Nilai ekonomi logam Platina sangat tinggi.
2. Pemanfaatan logam Platina dalam berbagai aplikasi.
3. Pemurnian logam platina dengan pembentukan senyawa kompleks.
4. Penentuan ligan yang paling tepat pada pembentukan senyawa kompleks dengan logam Platina.
5. Efisiensi penentuan ligan yang tepat dalam pembentukan senyawa kompleks melalui simulasi komputer.
6. Penentuan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) pada senyawa kompleks Platina dengan ligan-ligannya.

1.3. Batasan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas, maka batasan masalahnya sebagai berikut :

1. Perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) yang diukur adalah senyawa kompleks Platina dengan ligan Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilendiamin (en), Pyridin (Pyr), dan Dietiltriamin (dien) menggunakan simulasi komputer dengan program NWChem 6,2.
2. Ligan yang digunakan adalah ligan Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilendiamin (en), Pyridin (Pyr), dan Dietiltriamin (dien) yang akan membentuk kompleks dengan Platina.
3. Sintesis senyawa kompleks Platina dilakukan dengan menggunakan simulasi komputer dengan program NWChem 6,2.
4. Penggunaan simulasi komputer dengan program NWChem 6,2 berdasarkan mekanika kuantum.

1.4. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah dapat dikemukakan rumusan masalah sebagai berikut :

1. Bagaimana perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan ligan NH_3 menggunakan program NWChem 6,2?
2. Bagaimana perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan ligan Cl^- menggunakan program NWChem 6,2?
3. Bagaimana perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan ligan en menggunakan program NWChem 6,2?
4. Bagaimana perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan ligan Pyr menggunakan program NWChem 6,2?

5. Bagaimana perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan ligan dien menggunakan program NWChem 6,2?
6. Manakah senyawa kompleks yang memiliki perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) yang paling rendah yang terbentuk dari logam Platina dengan ligan Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilendiamin (en), Pyridin (Pyr), dan Dietiltriamin (dien) dengan menggunakan program NWChem 6,2?

1.5. Tujuan Penelitian

Adapun tujuan penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Untuk menentukan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan NH_3 menggunakan program NWChem 6,2.
2. Untuk menentukan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan Cl^- menggunakan program NWChem 6,2.
3. Untuk menentukan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan en menggunakan program NWChem 6,2.
4. Untuk menentukan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan Pyr menggunakan program NWChem 6,2.
5. Untuk menentukan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Platina dengan dien menggunakan program NWChem 6,2.
6. Untuk menentukan senyawa kompleks yang memiliki perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) yang paling rendah yang terbentuk dari logam Platina dengan ligan Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilendiamin (en), Pyridin (Pyr), dan Dietiltriamin (dien) dengan menggunakan program NWChem 6,2.

1.6. Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Diharapkan memberikan kontribusi dalam pengembangan metode sintesis senyawa kompleks terutama dalam aspek teoritis.
2. Memberikan informasi kepada masyarakat tentang pentingnya senyawa kompleks yang dapat digunakan untuk berbagai keperluan diantaranya untuk pemurnian logam, ekstraksi pada pengolahan logam dan berbagai kebutuhan lainnya.
3. Memberikan informasi kepada peneliti selanjutnya tentang pembentukan senyawa kompleks dengan ligan lain yang lebih cocok untuk logam Platina.