

**Penentuan Perubahan Entalpi (ΔH) Pada Proses
Pembentukan Senyawa Kompleks Antara
Logam Platina Dengan Ligan NH_3 , Cl^- ,
Pyr, en, dan dien, Menggunakan
Program NWChem 6,2**

Reza Zulmi (082244710009)

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa kompleks yang memiliki besarnya perubahan entalpi pembentukan senyawa kompleks (ΔH_f^0) logam Platina dengan ligan Amonia (NH_3), Klorida (Cl^-), Etilen diamin (en), Pyridin (Pyr), dan Dietilen triamin (dien) dengan menggunakan Program NWChem 6,2. Dalam menentukan besarnya energi logam Platina, ligan-ligan dan senyawa kompleks dengan simulasi komputer menggunakan program NWChem 6,2. Untuk melakukan perhitungann digunakan komputer dengan spesifikasi PC (Core 2 Duo, Dual Core, Centrino), server (intel Core 2 Duo, Double Quad, RAM 2 GB), Modem, External Hard Disk 1TB. Input data berupa z-matriks, optimasi geometri senyawa kompleks menggunakan program NWChem 6,2. Hasil yang diperoleh adalah perubahan entalpi (ΔH) untuk senyawa kompleks $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$ sebesar 0,74415364 HF ; $[\text{Pt}(\text{Cl})_2]$ sebesar 0,10474096 HF ; $[\text{Pt}(\text{Cl})_4]^{2-}$ sebesar 0,20948193 HF ; $[\text{Pt}(\text{en})]^{2+}$ sebesar 2,00000 HF ; $[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$ sebesar -0,00000020 HF ; $[\text{Pt}(\text{dien})]^{2+}$ sebesar 0,92292693 HF. Berdasarkan hasil perhitungan tersebut diperoleh senyawa kompleks $[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$ merupakan senyawa kompleks dengan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) terendah sedangkan senyawa kompleks $[\text{Pt}(\text{en})]^{2+}$ merupakan senyawa kompleks dengan perubahan entalpi pembentukan (ΔH_f) tertinggi. Sehingga dapat diketahui bahwa senyawa kompleks yang paling stabil dan mengalami reaksi spontan adalah senyawa kompleks $[\text{Pt}(\text{phy})_2]^{2+}$ dengan besar perubahan entalpi terendah yaitu $-0,00000020$ HF.