

## 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. Platina sangat berguna bagi pertumbuhan industri seperti dalam bidang otomotif digunakan sebagai elektroda dan katalis (catalytic converter), dalam bidang kedokteran platina biasa digunakan sebagai elektroda untuk alat pemacu jantung (heart pacemakers). Selain itu, banyak juga digunakan dalam kasus patah tulang dan lain sebagainya. Karena jenis penggunaannya yang banyak mengakibatkan sangat penting untuk dipelajari secara 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 (Etna, 2011).

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  $\text{Cl}^-$  dan  $\text{F}^-$ ; ion poliatomik seperti :  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_4^+$  serta dapat berupa senyawa netral seperti  $\text{NH}_3$  dan  $\text{H}_2\text{O}$ . Seperti telah

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

Kimia kuantum didasarkan pada postulat mekanika kuantum, di mana mekanika kuantum diperlukan untuk mempelajari partikel-partikel mikroskopis seperti elektron, inti atom dan molekul hal ini dikarenakan mekanika klasik tidak mampu menjelaskan kelakuan-kelakuan partikel dalam menguraikan sifat-sifat dasar partikel. Oleh karena itu digunakan simulasi komputer menggunakan komputasi kimia dengan program NW Chem, dalam kimia kuantum sistem digambarkan sebagai fungsi gelombang yang dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger (Sudanti, 2006).

Sesuai dengan Heisenberg uncertainty principle (1927), 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).

Teori orbital molekul dapat digunakan untuk menghitung kemungkinan letak elektron dan energi, Energi ini dikaitkan dengan fungsi gelombang dari orbital molekul dengan persamaan schordinger. Tingkat energi semuanya bernilai negatif, hal ini menyatakan bahwa elektron tidak memiliki energi yang cukup untuk melarikan diri dari inti. Tingkat energi yang terendah  $E_1$  disebut keadaan dasar (status dasar) dari atom itu dan tingkat energi yang lebih tinggi  $E_2, E_3, E_4$  di sebut keadaan eksitasi (status eksitasi). Ketika bilangan kuantum  $n$  bertambah, energi  $n E$  yang bersesuaian mendekati nol; dalam limit  $n = \infty, E_{\infty} = 0$  dan elektronnya tidak lagi terikat pada inti untuk membentuk atom. Energi positif untuk kombinasi inti elektron berarti bahwa elektronnya tidak terikat pada inti dan tidak ada syarat kuantum yang harus dipenuhinya kombinasi yang seperti itu tidak membentuk atom (Beiser, 1987).

Senyawa kompleks selalu dikaitkan dengan sintesis senyawa di laboratorium. Dan akan dilakukan sintesis senyawa kompleks dari Platina dengan ligan-ligan : Amonia ( $\text{NH}_3$ ), Klorida ( $\text{Cl}^-$ ), Etilendiamin (en), Dimetilglikol (glim), Bipyridin (bipy), Pyridin (py) dan Dietiltriainin (dien) menggunakan simulasi komputer dengan program NWChem. Dasar teori dari program aplikasi komputer ini adalah mekanika kuantum, di mana NWChem digunakan untuk mengatasi problem-problem kimia kuantum yang berkaitan dengan pemodelan molekul, yang dalam pelaksanaannya diawali dengan penentuan energi unsur, dan energi masing-masing ligan, serta pada akhirnya penentuan energi senyawa kompleks logam platina dengan berbagai ligan.

Perhitungan kimia kuantum menggunakan aplikasi 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 peneliti merasa tertarik untuk memilih judul **“Penentuan Energi Logam Platina, Senyawa  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, py, bipy, glim dan dien Dan Senyawa Kompleks Antara Logam Platina Dengan Ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, py, bipy, glim 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. Kesulitan menggunakan perhitungan secara analitis sehingga dibutuhkan pemodelan secara komputasi kimia
5. Penentuan ligan yang paling tepat pada pembentukan senyawa kompleks dengan logam Platina
6. Efisiensi penentuan ligan yang paling tepat dalam pembentukan senyawa kompleks melalui simulasi komputer.

7. Penentuan besarnya energi unsur, energi ligan serta energi pada senyawa kompleks yang terbentuk menggunakan program NWChem 6,2.

### 1.3 Batasan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah di atas, maka dapat disusun batasan masalah sebagai berikut :

1. Penentuan besarnya energi dari senyawa kompleks Platina dengan ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, py, bipy, glim dan dien menggunakan simulasi komputer dengan Program NWChem 6,2.
2. Ligan yang digunakan adalah ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, py, bipy, glim dan 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 menggunakan program NWChem 6,2 berdasarkan mekanika kuantum.

### 1.4 Rumusan Masalah

1. Berapa besar energi yang diperoleh dari logam platina menggunakan program NWChem 6,2?
2. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan Amonia ( $\text{NH}_3$ ) menggunakan program NWChem 6,2?
3. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan Klorida ( $\text{Cl}^-$ ) menggunakan program NWChem 6,2?
4. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan Etilendiamin (En) menggunakan program NWChem 6,2?
5. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan Pyridin (Py) menggunakan program NWChem 6,2?
6. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan Bipyridin (bipy) menggunakan program NWChem 6,2?
7. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan Dimetilglikol (glim) menggunakan program NWChem 6,2?

8. Berapa besar energi yang diperoleh dari ligan dietiltriamin (dien) menggunakan program NWChem 6,2?
9. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan  $\text{NH}_3$  menggunakan program NWChem 6,2?
10. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan  $\text{Cl}^-$  menggunakan program NWChem 6,2?
11. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan en menggunakan program NWChem 6,2?
12. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan py menggunakan program NWChem 6,2?
13. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan bipy menggunakan program NWChem 6,2?
14. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan glim menggunakan program NWChem 6,2?
15. Berapa besar energi dari senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan dien menggunakan program NWChem 6,2?

### 1.5 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Untuk menentukan energi logam Platina menggunakan program NWChem 6,2.
2. Untuk menentukan energi ligan Amonia ( $\text{NH}_3$ ) menggunakan program NWChem 6,2.
3. Untuk menentukan energi ligan klorida ( $\text{Cl}^-$ ) menggunakan program NWChem 6,2.
4. Untuk menentukan energi ligan Etilendiamin (en) menggunakan program NWChem 6,2.
5. Untuk menentukan energi ligan Pyridin (py) menggunakan program NWChem 6,2.
6. Untuk menentukan energi ligan Bipyridin (bipy) menggunakan program NWChem 6,2.

7. Untuk menentukan energi ligan Dimetilglukol (glim) menggunakan program NWChem 6,2.
8. Untuk menentukan energi ligan Dietilentriamin (dien) menggunakan program NWChem 6,2.
9. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan  $\text{NH}_3$  menggunakan program NWChem 6,2.
10. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan  $\text{Cl}^-$  menggunakan program NWChem 6,2.
11. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan en menggunakan program NWChem 6,2.
12. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan py menggunakan program NWChem 6,2.
13. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan bipy menggunakan program NWChem 6,2.
14. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan glim menggunakan program NWChem 6,2.
15. Untuk menentukan energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam platina dengan ligan dien menggunakan program NWChem 6,2.

### **1.6 Manfaat Penelitian**

Berdasarkan paparan diatas dimulai dari latar belakang masalah, rumusan masalah dan tujuan, maka manfaat yang diharapkan dalam penelitian ini adalah:

1. Bagi masyarakat secara umum, penulisan proposal penelitian diharapkan dapat menambah pengetahuan masyarakat tentang banyaknya manfaat senyawa kompleks terutama dalam pemurnian logam, ekstraksi pengolahan logam dan berbagai kebutuhan lainnya.
2. Memberikan sumbangan pemikiran berupa kajian-kajian literatur yang kemudian dapat pula digunakan sebagai referensi bagi para peneliti selanjutnya agar dapat menemukan senyawa kompleks yang lebih cocok untuk logam Platina khususnya.