

Penentuan Energi Logam Platina, Senyawa NH₃, Cl⁻, en, py, bipy, glim dan dien Dan Senyawa Kompleks Antara Logam Platina Dengan Ligan NH₃, Cl⁻, en, py, bipy, glim dan dien Menggunakan Program NWChem 6,2

Dian Rizki Julita (408231020)

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui besarnya energi logam Platina, energi ligan-ligan serta energi senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan NH₃, Cl⁻, en, py, bipy, glim dan dien 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 Quard, RAM 2 GB), Modem, External Hard Disk 1TB. Input data berupa z-matriks, optimasi geometri senyawa kompleks menggunakan program NWChem 6,2. Berdasarkan simulasi dan optimasi geometri dengan program NWChem versi 6,2. Maka diperoleh harga energi untuk logam Platina (Pt) adalah sebesar -17330,92375550 HF, ligan Amina (NH₃) sebesar -17330,92375550 HF ; Klorida (Cl⁻) sebesar -459,54260432 HF; Etilen diamin (en) sebesar -189,963 HF ; Pyridin (Py) sebesar -189,96364019 HF ; Dimetilglikol (glim) sebesar -306,82660441 HF ; Bipyridin (bipy) sebesar -490,96100756 HF ; Dietilen triamin (dien) sebesar -321,04006404 HF. Sedangkan harga energi yang diperoleh untuk senyawa kompleks [Pt(NH₃)₂]²⁺ sebesar -17442,54404204 HF ; [Pt(Cl)₂]²⁺ sebesar -18249,90422300 HF ; [Pt(Cl)₄]²⁻ sebesar -19168, 88469049 HF ; [Pt(en)]²⁺ sebesar -17518,88739569 HF ; [Pt(Phy)₂]²⁺ sebesar -17821,26513628HF ; [Pt(glim)]²⁺ sebesar -17636,180 HF ; [Pt[(bipy)]²⁺ sebesar -17820,267 HF ; [Pt(dien)]²⁺ sebesar -17651,0408 9261 HF. Berdasarkan hasil perhitungan tersebut diperoleh ligan Amina merupakan ligan yang memiliki harga energi terendah. Sedangkan perhitungan energi pada senyawa kompleks diperoleh [Pt(NH₃)₂]²⁺ sebagai senyawa kompleks yang memiliki harga energi terendah. Sehingga dapat diketahui senyawa kompleks yang paling stabil adalah senyawa kompleks [Pt(NH₃)₂]²⁺ yang memiliki harga energi terendah yaitu sebesar -17442,54404204 HF.