

# LAPORAN PENELITIAN

HIBAH PENELITIAN KERJA SAMA ANTAR PERGURUAN TINGGI  
(HIBAH PEKERTI)



## KAJIAN TEORITIS PEMBENTUKAN SENYAWAAN KOMPLEKS ANTARA LOGAM PLATINA DENGAN BEBERAPA LIGAN MENGGUNAKAN PROGRAM NWCHEM

Tim Peneliti Pengusul (TPP UNIMED Medan)  
Drs. Asep Wahyu Nugraha, M.Si (Ketua)  
Dra. Ratu Evina Dibyantini, M.Si (Anggota)

Tim Peneliti Mitra (TPM ITB Bandung)  
Muhamad A. Martoprawiro, Ph.D

Dibiayai dari Dirjen Dikti dengan Surat Perjanjian Penugasan

Nó. 0977/UN33.17/SPMK/2012, tanggal 12 Maret 2012

UNIVERSITAS NEGERI MEDAN

NOVEMBER, 2012

## LEMBAR PENGESAHAN LAPORAN AKHIR

1. Judul Penelitian : Kajian Teoritis Pembentukan Senyawaan Kompleks Antara Logam Platina Dengan Beberapa Ligan Menggunakan Program NWCHEM
2. Ketua Peneliti
- a. Nama Lengkap : Drs. Asep Wahyu Nugraha, M.Si
- b. Jenis Kelamin : Laki/ Laki
- c. NIP : 196706091992031001
- d. Pangkat/ Golongan : Pembina Tk I/ IV-b
- e. Jabatan Fungsional : Lektor Kepala
- f. Fakultas/ Jurusan : FMIPA/ Kimia
- g. Perguruan Tinggi : UNIMED
- h. Lembaga Penelitian : Lembaga Penelitian UNIMED
3. Jumlah Tim peneliti : 3 (tiga) orang
4. Lokasi Penelitian : Lab. Kimia FMIPA UNIMED, Lab Kimia Teori FMIPA ITB Bandung
5. Kerjasama dengan Instansi Lain : Ada
6. Masa Penelitian : 8 (delapan) bulan
7. Biaya yang disetujui : Rp 57.500.000 (lima puluh enam juta rupiah)  
Surat Perintah Mulai Kerja (SPMK)  
No. 0977/UN33.17/SPMK/2012, tanggal 12 Maret 2012

Mengetahui:

Ketua FMIPA UNIMED



Prof. Mlotian, M.Sc., Ph.D  
NIP. 193908051986011001

Medan, September 2011

Ketua Peneliti,

Drs. Asep Wahyu Nugraha, M.Si  
NIP. 196706091992031001

Menyetujui:

Ketua Lembaga Penelitian  
Universitas Negeri Medan (UNIMED)



Prof. Drs. Mambur Situmorang, MSc, PhD  
NIP. 196008091986011001

# KAJIAN TEORITIS PEMBENTUKAN SENYAWAAN KOMPLEKS ANTARA LOGAM PLATINA DENGAN BEBERAPA LIGAN MENGGUNAKAN PROGRAM NWCHEM

Oleh:

Asep Wahyu Nugraha<sup>\*</sup>, Muhamad A. Martoprawiro<sup>\*\*</sup>, Ratu Evina Dibyantini<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>Jurusan Kimia FMIPA UNIMED Medan

<sup>\*\*</sup>Jurusan Kimia FMIPA ITB Bandung

## RINGKASAN

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan energi logam Platina, ligan-ligan, dan senyawa kompleks menggunakan program NWCHEM. Berdasarkan data-data yang diperoleh dapat ditentukan data-data kestabilan senyawa kompleks yang terbentuk. Penelitian ini telah dilaksanakan di Laboratorium Kimia FMIPA UNIMED Medan dan Laboratorium Kimia Fisika FMIPA ITB Bandung. Alat alat yang digunakan adalah seperangkat server dengan software NWCHEM 6.0. Berdasarkan hasil perhitungan dan analisis hasil perhitungan dapat dikemukakan beberapa kesimpulan sebagai berikut: Metode perhitungan komputasi yang paling optimal dalam penentuan Energi unsur Ag, senyawa dari ligan-ligan NH<sub>3</sub>, Cl, en, glim, py, bpy, dan dien, dan senyawa kompleks yang terbentuk adalah basis set perhitungan "wtbs". Besarnya energi dari senyawa-senyawa kompleks yang dianalisa adalah [Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> = -17.442,544 HF, [Pt(Pyr)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> = -17.821,265 HF, [Pt(dien)]<sup>2+</sup> = -17.651,041 HF, [Pt(en)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> = -17.518,887 HF, [Pt(Cl)<sub>2</sub>] = -18.249,904 HF, [Pt(Cl)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> = - 19.168,885 HF, [Ptglim]<sup>2+</sup> = -17.636,180 HF, dan [Pt(bipy)]<sup>2+</sup> = -17.820,267 HF. Berdasar perubahan energy pembentukan diperoleh bahwa senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk adalah [Pt(Pyr)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>

Kata-kata kunci: Platina, senyawa kompleks, ligan, energi.

UNIMED

THE  
Character Building  
UNIVERSITY

## KATA PENGANTAR

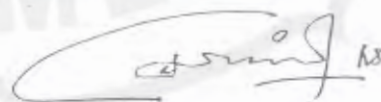
Kami panjatkan puji dan syukur kehadirat Allah swt yang atas perkenan dan ridla-Nya kami dapat menyelesaikan Penelitian dan Penulisan Laporan Penelitian. Meskipun pada proses dan hasilnya masih terlalu jauh dari sempurna, hal ini terjadi karena keterbatasan kami sebagai manusia.

Penelitian ini berjudul: **Kajian Teoritis Pembentukan Senyawaan Kompleks Antara Logam Platina Dengan Beberapa Ligan Menggunakan Program NWCHEM**

Dalam pelaksanaan penelitian ini dan penulisan Laporan penelitian ini, kami mendapatkan bantuan dari berbagai pihak baik secara langsung maupun secara tidak langsung yang tidak mungkin disebutkan satu per satu. Oleh karena itu kami ucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya atas bantuan yang telah Bapak/ Ibu berikan. Semoga amal baik Bapak/ Ibu mendapatkan balasan yang setimpal dari Allah swt.

Akhirnya kami mengharapkan mudah-mudahan Penelitian dan Laporan ini bermanfaat bagi pihak-pihak yang berkepentingan. Kami menyadari bahwa pelaksanaan penelitian dan penulisan laporan ini sangat jauh dari memadai. Oleh karena itu kritik dan saran sangat diharapkan demi perbaikan kami dimasa yang akan datang.

Medan, November 2012



**Drs. Asep Wahyu Nugraha, M.Si**

NIP. 196706091992031001

THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

## DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN .....	i
RINGKASAN .....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI .....	iv
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	
A. Latar Belakang Masalah .....	1
B. Perumusan Masalah .....	2
<b>BAB II STUDI PUSTAKA</b>	
A. Senyawa Kompleks .....	4
B. Logam Perak dan Platina .....	6
C. Ligan .....	7
D. Mekanika Kuantum .....	8
E. Kajian Komputasi Kimia .....	8
F. Penelitian Pendahuluan .....	13
<b>BAB III TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN</b>	
A. Tujuan Penelitian .....	15
B. Manfaat penelitian .....	15
<b>BAB IV METODE PENELITIAN</b>	
A. Lokasi Penelitian .....	16
B. Alat dan Bahan .....	16
C. Prosedur Penelitian .....	16
D. Target/ Indikator Keberhasilan Penelitian .....	19
<b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	
A. Hasil Penelitian .....	20
B. Pembahasan .....	21
<b>BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN</b>	
A. Kesimpulan .....	27
B. Saran-saran .....	27
C. Rencana Penelitian Selanjutnya .....	28
DAFTAR PUSTAKA .....	29
LAMPIRAN-LAMPIRAN .....	31

# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang Masalah

Logam Perak dan Platina merupakan logam yang memiliki karakteristik yang unik, salah satu sifat yang menonjol dari logam-logam tersebut adalah Perak termasuk logam yang sulit berreaksi dan logam Platina memiliki sifat yang lebih sulit berreaksi dengan senyawaan lainnya. Dalam kehidupan sehari-hari pemakaian Perak dan Platina termasuk banyak kegunaannya. Selain digunakan sebagai perhiasan kedua jenis logam tersebut juga digunakan dalam industri sebagai katalis, sebagai bahan baku dari kerajinan, perlengkapan automotif, peralatan medis, dan berbagai keperluan lainnya. Karena jenis penggunaannya yang banyak mengakibatkan sangat penting untuk mempelajari khususnya dalam hal pengembangan metode pemurnian logam-logam tersebut. Banyaknya metode pemurnian logam terutama pemurnian logam yang berasal dari sampel alam. Salah satu metoda pemurnian logam yang biasa dilakukan melalui pembentukan senyawa kompleks dari logam-logam tersebut.

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 yang akan disintesis dan mekanisme pembentukan senyawa kompleks tersebut. Dalam penelitian ini akan dikaji pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien. Disamping ligan-ligan yang telah ditentukan juga terbuka untuk melakukan simulasi menggunakan ligan-ligan lainnya. Efektivitas reaksi kimia tidak hanya ditentukan oleh jenis reaktan tetapi kondisi reaksi tersebut dalam hal ini suasana reaksi kimia. Untuk itu dalam penelitian ini akan diamati data stabilitas/ energi keadaan transisi, stabilitas senyawa kompleks yang terbentuk sehingga mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks tersebut dapat ditentukan.

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  $\text{F}^-$ ; senyawa ionik seperti  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_4^+$  serta senyawaan 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. Dalam proses

pembentukannya ligan dapat memberikan satu pasang elektron bebasnya untuk digunakan bersama dengan atom pusat, jenis ligan seperti ini disebut sebagai ligan monodentat. Ligan yang dapat memberikan dua pasang elektron bebas disebut dengan ligan bidentat sedangkan ligan yang dapat memberikan lebih dari dua pasang elektron bebas disebut polidentat.

Pengetahuan tentang senyawa kompleks dapat digunakan untuk berbagai keperluan diantaranya untuk pemurnian logam, ekstraksi pada pengolahan logam, dan berbagai kebutuhan lainnya. Pada saat ini penelitian tentang senyawa kompleks telah dilakukan diantaranya sintesis, karakterisasi senyawa kompleks. Berbagai penelitian terdahulu telah dilakukan diantaranya sintesis dan karakterisasi spektroskopi senyawa kompleks  $\text{Co}(\text{Bpy})^{2+}$  dan  $\text{Co}(\text{Phen})^{2+}$  (Sukro, 2003), Selain itu Bastian dan Sigel (1996) telah meneliti tentang konstanta stabilitas kompleks  $\text{Cu}(\text{Bpy})^{2+}$  dan  $\text{Cu}(\text{Phen})^{2+}$ , serta Bruckner (2004) telah meneliti kompleks dari Perak (II) dan (III) Porphyrin, Corroles, dan Carbaporphyrin. Kajian teori tentang senyawa kompleks menggunakan simulasi komputer dilakukan oleh Male (2010).

Selama ini penelitian senyawa kompleks selalu dikaitkan dengan sintesis senyawa kompleks di laboratorium. Dalam penelitian ini akan dilakukan sintesis senyawa kompleks dari logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien menggunakan simulasi komputer dengan program Gaussian. Dalam sintesis senyawa kompleks penentuan ligan yang tepat dilakukan berdasarkan prediksi berdasar data-data sifat senyawa yang akan bereaksi membentuk senyawa kompleks. Dalam penelitian ini akan dikembangkan sebuah metode sintesis senyawa kompleks dalam hal ini menggunakan logam Perak dan Platina dengan berbagai ligan.

## B. Perumusan Masalah

Permasalahan dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Metode komputasi apakah yang paling optimal digunakan dalam proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
2. Bagaimanakah keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien?
3. Berapakah nilai Energi Aktivasi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.

4. Berapakah nilai perubahan energi dalam proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien?
5. Senyawa Kompleks apakah yang paling mudah terbentuk dalam reaksi antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.



THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY



## BAB II

### STUDI PUSTAKA

Dalam pembahasan penelitian ini bagian tinjauan pustaka dapat dibagi dalam beberapa bagian, yaitu Senyawa Kompleks, Logam Platina, ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien, serta Kimia Kuantum dan Kajian Komputasi Kimia.

#### A. Senyawa Kompleks.

Penemuan yang mendasar dalam kimia anorganik diperoleh dari penelitian SM Jorgensen (1837 – 1914) seorang ahli kimia dari Denmark dan Alfred Werner (1866 – 1919) seorang ahli kimia Swiss. Ketika mereka memulai penelitiannya sifat senyawaan koordinasi masih merupakan teka teki dimana gagasan yang mutakhir mengenai valensi dan struktur tidak dapat diterima. Untuk menjawab berbagai permasalahan tentang senyawa kompleks Werner mengembangkan suatu konsep mengenai ligan di sekeliling ion logam pusat – konsep suatu kompleks koordinasi – dan mendeduksi struktur geometrinya. Secara lebih rinci teori tentang senyawa-senyawa kompleks, yang sekarang dikenal dengan teori koordinasi memiliki tiga postulat sebagai berikut:

- a. Kebanyakan unsur memiliki dua jenis valensi, yaitu:
  - (i) valensi primer (.....) yang sekarang disebut elektrovalensi atau bilangan oksidasi
  - (ii) valensi sekunder ( \_\_\_\_ ) yang sekarang disebut kovalensi atau bilangan koordinasi
- b. Tiap-tiap unsur berkehendak untuk menjenuhkan baik valensi primernya maupun valensi sekundernya.
- c. Valensi sekunder diarahkan pada kedudukan tertentu di dalam ruang (Cotton, 1989)

Seperti telah dikemukakan di muka bahwa bilangan koordinasi akan menentukan bentuk senyawa kompleks. Bilangan koordinasi dua bentuk geometrinya linier contoh kationnya adalah ion  $+1$  dari Cu, Ag, dan Au. Bilangan koordinasi tiga, geometrinya adalah planar dan piramidal, contohnya ion  $\text{HgI}_3^-$  planar ;  $\text{SnCl}_3^-$  piramidal,  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{FeCl}_3$ , dan  $\text{PtCl}_2\text{PR}_3$ . Bilangan koordinasi empat memberikan dua geometri yaitu tetrahedral dan bujursangkar contohnya  $\text{Pt}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{ReO}_4^-$ . Bilangan koordinasi lima, geometrinya bipiramidal trigonal dan piramidal bujursangkar. Bilangan koordinasi enam, sangat penting karena hampir semua kation membentuk kompleks koordinasi 6, bentuk molekulnya oktahedron.

Kebanyakan ligan merupakan anion atau molekul netral yang merupakan donor elektron. Ligan yang dapat menyumbangkan satu pasang elektron disebut monodentat seperti  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ . Ligan yang dapat memberikan dua pasang elektron disebut ligan bidentat seperti etilendiamin, difos, glim, karboksilat, dithiokarbamat, dan lainnya. Ligan

polidentat adalah tri -, kuadri -, penta -, heksadentat. Contohnya dietilen triamin, terpiridil, EDTA, dan lainnya.

Stabilitas kompleks dapat dinyatakan dalam bentuk tetapan kesetimbangan pembentukan senyawa kompleks. Pernyataan tetapan kesetimbangan kompleks dapat dinyatakan dalam bentuk  $M + L \rightleftharpoons ML$

Dengan M kation logam pusat, L ligan, dan ML senyawa kompleks maka tetapan stabilitas

kompleks adalah: 
$$K = \frac{[ML]}{[M][L]}$$

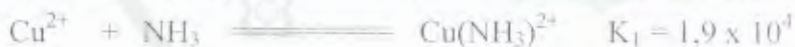
Tetapan stabilitas asam lemah untuk titrasi dengan suatu basa kuat adalah:



$$K = \frac{[OAc^-]}{[HOAc][OH^-]}$$

Harga K sekitar  $10^8$  sudah cukup sempurna pada titik ekuivalen untuk suatu titrasi yang dapat dilakukan. Kita dapat meramalkan bahwa suatu reaksi yang menghasilkan suatu kompleks berbentuk ML dengan besar tetapan stabilitas yang sama yang harus memberikan suatu titrasi yang mungkin dengan persyaratan konsentrasi yang sebanding.

Selain itu dalam proses pembentukan suatu kompleks reaksi antara ion logam dengan ligan berlangsung dalam beberapa tahap, seperti  $Cu(NH_3)_4^{2+}$  berlangsung dalam empat tahap:



Secara keseluruhan reaksi dapat dinyatakan:



$$K = \frac{[Cu(NH_3)_4^{2+}]}{[Cu^{2+}][NH_3]^4} = K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_4 = 8,1 \times 10^{12}$$

maka tetapan kesetimbangan cukup besar bagi suatu titrasi yang dapat dilakukan. Titrasi suatu asam kuat dengan amoniak,  $H_3O^+ + NH_3 \rightleftharpoons NH_4^+ + H_2O$ , dengan K sebesar  $1,8 \times 10^9$  adalah mungkin dilakukan.

Perilaku senyawa kompleks juga dapat ditinjau dari Teori medan kristal, dimana ion logam  $M^{m+}$  yang terletak pada pusat suatu set oktahedral dari titik-titik muatan. Ion logam memiliki orbital d, elektron pada orbital d tersebut akan memiliki kemungkinan yang sama mengenai kehadirannya dalam salah satu dari lima orbital d di mana saja karena semuanya

setara. Namun sekarang orbital-orbital d tidak semuanya setara, beberapa terkonsentrasi dalam daerah ruang yang lebih dekat ke ion-ion negatif daripada yang lain dan jelas elektron akan lebih menyukai berada dalam orbital, dimana elektron tersebut berada sejauh mungkin dari muatan negatif. Dari gambar diketahui bahwa orbital  $d_z^2$  dan  $d_{x^2-y^2}$  memiliki cuping yang sangat terkonsentrasi dalam lingkungan muatan; sedangkan  $d_{xy}$ ,  $d_{yz}$ ,  $d_{zx}$  memiliki cuping yang terarah diantara muatan. Jadi ion logam memiliki dua jenis orbital d: tiga dari satu jenis, yang setara sesamanya dan bertanda  $t_{2g}$ , dan dua jenis yang lain bertanda  $e_g$ ; harga energi dua orbital berbeda orbital  $e_g$  energinya lebih tinggi dibandingkan  $t_{2g}$ . Besarnya perbedaan energi antara  $e_g$  dan  $t_{2g}$  sebesar  $\Delta_0$ . Kuantitas  $\Delta_0$  akan menentukan sifat dari senyawa kompleks yang terbentuk.

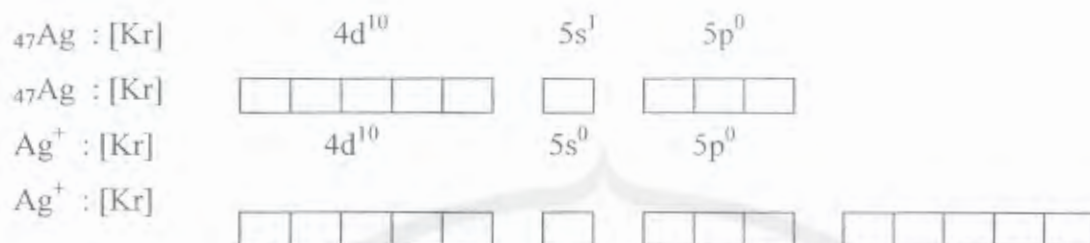
Salah satu penerapan teori medan ligan adalah untuk menentukan sifat elektrostatis sederhana (medan kristal), atau dalam bentuk yang lebih canggih adalah untuk memahami dan mengaitkan sifat magnetik dari kompleks logam transisi. Sifat magnetik senyawa-senyawa ini dapat digunakan untuk mengidentifikasi dan mengkarakterisasi senyawa kompleks. Untuk menentukan sifat paramagnetik senyawa kompleks adalah jumlah elektron yang tidak berpasangan, semakin banyak elektron pada orbital d yang tidak berpasangan mengakibatkan sifat paramagnetiknya semakin besar.

## B. Logam Perak dan Platina

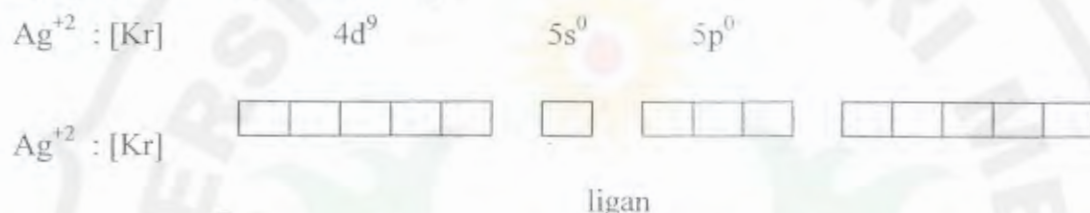
Logam Perak dan Platina merupakan salah satu logam yang memiliki karakteristik yang unik, salah satu sifat yang menonjol dari Perak dan Platina adalah Perak dan Platina termasuk logam yang sulit berreaksi dengan senyawa lain. Pemakaian Perak termasuk banyak selain digunakan sebagai perhiasan, Platina juga digunakan dalam industri sebagai katalis, sebagai bahan baku dari kerajinan, perlengkapan automotif, peralatan medis, dan berbagai pemakaian lainnya. Karena pemakaiannya yang banyak mengakibatkan sangat penting untuk mempelajari khususnya dalam hal pemurnian logam tersebut. Salah satu metoda pemurnian dilakukan dengan pembentukan senyawa kompleks.

Perak adalah logam putih, dapat ditempa, dan liat. Rapatannya tinggi (10,5 gr/ml) dan melebur pada  $960,5^\circ\text{C}$  (Vogel, 1990).

Dalam pembentukan senyawa kompleks logam Perak harus menyediakan orbital kosong yang akan diisi oleh pasangan elektron yang berasal dari ligan. Dalam pembahasan senyawa kompleks yang berasal dari unsur Perak sangat diperlukan untuk membahas struktur elektronis dari unsur Ag, ion  $\text{Ag}^+$ , dan ion  $\text{Ag}^{2+}$ . Dengan diketahuinya struktur elektronisnya dapat diprediksikan senyawa kompleks yang akan terbentuk.



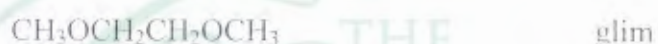
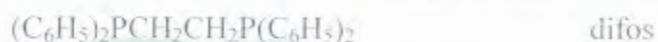
Bagi ligan monodentat terdapat ion kompleks  $\text{AgL}^+$ ,  $\text{AgL}_2^+$ ,  $\text{AgL}_3^+$ ,  $\text{AgL}_4^+$  tetapan  $k_1$  dan  $k_2$  biasanya tinggi sedangkan  $k_3$  dan  $k_4$  relatif kecil dengan demikian spesies utama adalah  $\text{AgL}_2^+$  yang linier (Cotton, 1989).

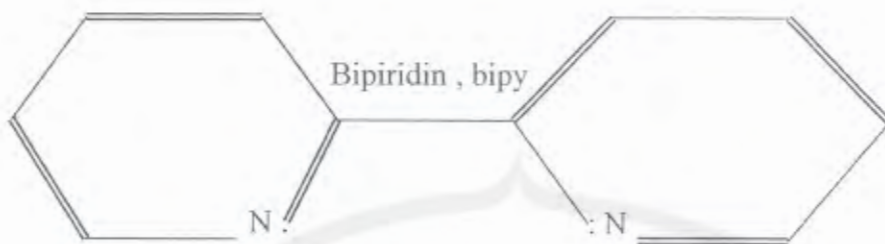


Ag(II) dan Ag(III) terdapat dalam kompleks dengan ligan yang cocok; cara yang cocok adalah untuk mengoksidasi  $\text{Ag}^+$  dengan adanya ligan. Jadi oksidasi dengan  $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$  dengan adanya piridin menghasilkan ion merah  $[\text{Agpy}_4]^{2+}$  sedangkan dalam larutan alkali periodat diperoleh  $[\text{Ag}(\text{IO}_6)_2]^{7-}$  (Cotton, 1989).

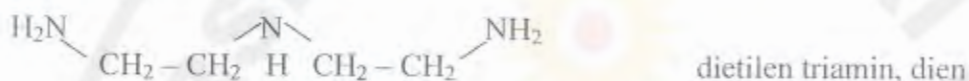
### C. Ligan

Kebanyakan ligan adalah anion atau molekul netral yang merupakan donor pasangan elektron. Beberapa jenis ligan yang umum adalah  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{CN}^-$ ,  $\text{NH}_3$ , dan  $\text{H}_2\text{O}$ , jenis-jenis ligan ini dapat menyumbangkan satu pasang elektron kepada atom pusat yang disebut sebagai ligan monodentat. Ligan yang mengandung dua atau lebih atom yang masing-masing secara serempak membentuk dua ikatan donor-elektron kepada ion logam yang sama disebut bidentat. Contoh dari ligan jenis ini adalah:





Ligan polidentat adalah ligan yang dapat menyumbangkan tiga, empat, lima, dan enam secara serempak kepada atom pusat, yaitu tri -, kuadri -, penta -, dan heksadentat. Salah satu contoh dari ligan jenis ini adalah:



#### D. Mekanika Kuantum

Mekanika Kuantum atau mekanika gelombang memberi pengertian semua teori tentang materi yang didasarkan fenomena alam. Materi terdiri atas molekul dan atom yang masing-masing tersusun dari partikel yaitu proton, neutron, dan elektron. Mekanika kuantum harus secara penuh dapat menguraikan sifat-sifat dasar partikel. Bagi para peneliti bidang kimia, elektron merupakan partikel yang sangat penting, karena sifat dari suatu molekul atau senyawa sangat tergantung pada perilaku elektron yang terlibat dalam pembentukan senyawa tersebut. Mekanika kuantum menurunkan sejumlah persamaan yang mengindikasikan kemungkinan kedudukan dan energi partikel dalam atom dan molekul. Persamaan ini kompleks dan sulit penyelesaiannya, kecuali untuk molekul yang paling sederhana. Penyusunan persamaan mudah dikerjakan pada kasus molekul yang lebih besar dengan menyederhanakan penalaran. Elektron dalam molekul dapat diperkirakan untuk dihubungkan dengan cakupan orbital keseluruhan molekul yang diketahui sebagai teori orbital molekul.

Teori orbital molekul dapat digunakan untuk menghitung kemungkinan letak elektron dan energi. Energi ini dikaitkan dengan fungsi gelombang dari orbital molekul dengan persamaan Schrodinger. Penggunaan komputer dapat digunakan secara baik untuk memperkirakan sifat molekul yang besar seperti senyawa kompleks. Perhitungan orbital molekul pada molekul obat dapat memberikan indikasi numerik yang menggambarkan struktur elektron. Perubahan tertentu dari indikasi numerik ini dapat menggambarkan perubahan struktur yang memberikan variasi aktivitas senyawa kompleks.

#### E. Kajian Komputasi Kimia

Komputer yang semula dirancang untuk menghitung dan menulis, dalam perkembangan berikutnya ternyata dapat menembus berbagai aspek kehidupan manusia, serta

dapat digunakan untuk berbagai keperluan. Hampir semua informasi dapat ditangani dan di proses dengan berbagai cara oleh komputer. Hal ini Karena komputer mampu “mengkode” berbagai macam bentuk data ke dalam bentuk digital biner (1 dan 0 atau on dan off). Banyak penggunaan komputer saat ini jauh dari kegiatan hitung-menghitung sebagaimana komputer pertama kali dibuat. (Akhadi, 2001). Hal ini didasari oleh banyaknya program atau software yang kini dirancang tidak hanya untuk perhitungan dan penulisan saja, tetapi dapat digunakan dalam melakukan penelitian seperti HyperChem, HyperNMR, NEWHEAT, SPSS, Gaussian, dan Gammess.

Problem-problem kimia kuantum yang berkaitan dengan molekul umumnya diselesaikan dengan pendekatan matematis yang rumit karena menyangkut penyelesaian diferensial dan integral dari persamaan fungsi gelombang . Pada sistem monoatom dan dwiatom, problem ini dengan hati-hati dapat dihitung secara manual, namun pada sistem molekul yang lebih kompleks, perhitungan manual menjadi sulit , disamping probabilitas kesalahan perhitungan yang tinggi, juga membutuhkan waktu yang lama sehingga problem ini menjadi tidak menarik untuk dipecahkan. Maka dengan adanya berbagai program aplikasi kimia ini maka problem-problem itu dapat lebih mudah diatasi. Hal ini juga dapat menunjang munculnya penelitian kimia komputasi.

Program NWCHEM memiliki penggunaan dan aplikasi yang luas, terutama dalam bidang kimia. Program ini juga memberikan berbagai fasilitas yang dapat digunakan dalam berbagai penelitian kimia teoritis dan semi teoritis, seperti:

- Studi mekanika molekuler, studi Ab Initio atau studi semi empiris terhadap sifat molekuler suatu senyawa kimia.
- Analisis konformasi molekul.
- Studi reaktivitas biologi suatu senyawa obat untuk pembuatan senyawa obat baru
- Design ligan-ligan baru.
- Simulasi Molekuler Dinamik, Monte Carlo dan Simulasi Langevin.
- Prediksi spektra IR dan UV-Vis.
- Prediksi struktur keadaan transisi molekul dalam reaksi kimia.
- Mempelajari polaritas (momen dipol) suatu senyawa dan kedudukan koordinat atom dalam molekul.

Dan sampai saat ini, penggunaan program-program aplikasi kimia komputer sebagai instrumen dalam penelitian kimia makin hari makin signifikan keberadaannya, mengingat ada beberapa keunggulan yang dapat diperoleh melalui penggunaan komputer dengan program

ini seperti yang disebutkan diatas. Satu hal yang sangat penting untuk dipahami adalah hasil-hasil yang diperoleh dari perhitungan dengan program simulasi komputer hanya berupa nilai prediksi, yang dalam keadaan tertentu dapat menjadi terdeviasi jauh dari keadaan real dan fakta laboratorium. Namun dengan pesatnya perkembangan program ini telah memberikan berbagai pendekatan perhitungan terhadap sistem molekuler yang juga semakin berkembang sehingga perhitungannya telah dibuat terstruktur serta dengan algoritme tertentu yang memungkinkan pembuatan softwarena, maka nilai prediksi yang diberikan dari hasil perhitungan menjadi lebih dekat ke fakta eksperimen.

Simulasi komputer dalam suatu penelitian berguna untuk mengetahui sifat-sifat elektronis dan optimasi geometris suatu molekul. Hal ini dilakukan hanya untuk mempermudah penelitian kimia, karena dalam menentukan sifat-sifat tersebut suatu molekul tidak lagi harus diamati melalui eksperimen di laboratorium.

Nilai prediksi dari perhitungan berbagai program simulasi komputer seperti HyperChem, NWChem, Gaussian, dan Gamess dapat diperoleh dari beberapa metode perhitungan sistem molekuler, seperti metode semi empiris maupun Ab Initio. Dan salah satu metode semiempiris yang sering digunakan dalam penelitian adalah metode AM 1, karena metode ini merupakan metode yang cukup akurat untuk perhitungan sifat elektronis, optimasi bentuk molekul dan energi total suatu molekul. Penggunaan lebih dari satu metode serta membandingkan hasil-hasilnya merupakan salah satu pendekatan penelitian yang dapat ditempuh guna memperkecil deviasi nilai tersebut terhadap nilai eksperimen. Pendekatan lain yang dapat ditempuh adalah mencari korelasi antara hasil eksperimen dan perhitungan teoritis dengan program HyperChem sebagai contoh untuk sistem molekuler yang telah diteliti secara eksperimen, jika korelasi yang ditemukan cukup tinggi, maka untuk sistem molekuler lain dapat diprediksi melalui hasil-hasil yang telah ada. (Arif dan Susilowati, 1998).

NWChem merupakan program komputasi kimia yang didisain untuk bekerja dengan kinerja tinggi pada system supercomputer parallel. Kemampuan dalam melakukan perhitungan energy elektronik molekul dan melakukan analisis menggunakan Hartree-Fock selfconsistent field (SCF) theory, Gaussian density function theory (DFT), and second-order perturbation theory. Pada semua metoda, optimasi geometri digunakan untuk menentukan energy minimum dan keadaan transisi. Kemampuan molekul dinamis klasik untuk melakukan simulasi makromolekul dan larutan termasuk didalamnya menentukan energy bebas menggunakan medan gaya yang bervariasi.

Dalam perhitungan Energi unsur, senyawa ligan dan senyawa kompleks dilakukan uji coba terhadap berbagai model perhitungan untuk menentukan model perhitungan yang paling optimal digunakan. Model perhitungan nwChem 6.0, adalah:

1. Basis set standard untuk seluruh electron dalam unsur dan senyawa yang diamati, diantaranya:
  - a. Basis Set "STO-2G" (number of atoms 21)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sr
  - b. Basis Set "STO-3G" (number of atoms 53)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I
  - c. Basis Set "cc-pVDZ(seg-opt)" (number of atoms 24)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
  - d. Basis Set "cc-pVTZ(seg-opt)" (number of atoms 24)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
  - e. Basis Set "Sadlej pVTZ" (number of atoms 19)  
H Li Be C N O F Na Mg Si P S Cl K Ca Br Rb Sr I
  - f. Basis Set "WTBS" (number of atoms 84)  
He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe Cs Ba La Ce Pr Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn
2. Basis set Resolution of Identity (RI) fitting diantaranya
  - a. Basis Set "cc-pVDZ-fit2-1" (number of atoms 10)  
H He Li Be B C N O F Ne
  - b. Basis Set "cc-pVTZ-fit2-1" (number of atoms 10)  
H He Li Be B C N O F Ne
3. Basis set Density functional specific diantaranya:
  - a. Basis Set "DZVP (DFT Orbital)" (number of atoms 54)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe
  - b. Basis Set "DZVP2 (DFT Orbital)" (number of atoms 25)  
H He Li Be B C N O F Al Si P S Cl Ar Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn
  - c. Basis Set "TZVP (DFT Orbital)" (number of atoms 11)  
H C N O F Al Si P S Cl Ar
4. Basis set Density functional Coulomb and Exchange fitting diantaranya:
  - a. Basis Set "DGauss A1 DFT Coulomb Fitting" (number of atoms 54)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe
  - b. Basis Set "DGauss A1 DFT Exchange Fitting" (number of atoms 54)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe
5. Basis set Effective core potentials and their respective diantaranya:
  - a. Basis Set "Hay-Wadt MB (n+1) ECP" (number of atoms 32)  
K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cs Ba La Ta W Re Os Ir Pt Au
  - b. ECP "Hay-Wadt MB (n+1) ECP" (number of atoms 32)



- K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cs Ba La Ta W Re  
Os Ir Pt Au
- c. Basis Set "Hay-Wadt VDZ (n+1) ECP" (number of atoms 32)  
K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cs Ba La Ta W Re  
Os Ir Pt Au
6. Basis set Douglas-Kroll (DK) all-electron diantaranya:
- a. Basis Set "cc-pVDZ DK" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
- b. Basis Set "cc-pVTZ DK" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
- c. Basis Set "cc-pVQZ DK" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
7. Basis set Dyall's Modified Dirac (DmD) all-electron diantaranya:
- a. Basis Set "cc-pvdz fi sf fw" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
- b. Basis Set "cc-pvdz fi sf lc" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
- c. Basis Set "cc-pvdz fi sf sc" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
- d. Basis Set "cc-pvdz pt sf fw" (number of atoms 20)  
H He B C N O F Ne Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
8. Polarization functions:
- a. Basis Set "STO-3G\* Polarization" (number of atoms 8)  
Na Mg Al Si P S Cl Ar
- b. Basis Set "3-21G\* Polarization" (number of atoms 8)  
Na Mg Al Si P S Cl Ar
- c. Basis Set "6-31G\* Polarization" (number of atoms 27)  
Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Co Ni Cu Zn
- d. Basis Set "6-31G\*\* Polarization" (number of atoms 29)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Co Ni Cu Zn
- e. Basis Set "6-311G\* Polarization" (number of atoms 23)  
Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr I
9. Diffuse functions:
- a. Basis Set "Pople-style Diffuse" (number of atoms 19)  
H Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca
- b. Basis Set "Dunning-Hay Diffuse" (number of atoms 9)  
H-Li Be B C N O F Ne
- c. Basis Set "aug-cc-pVDZ Diffuse" (number of atoms 24)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br Kr
- d. Basis Set "aug-cc-pVTZ Diffuse" (number of atoms 23)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar Ga Ge As Se Br
10. Core-valence functions:
- a. Basis Set "Core/val. Functions (cc-pCVDZ)" (number of atoms 12)  
Li Be B C N O F Ne Na Mg Si Cl
- b. Basis Set "Core/val. Functions (cc-pCVTZ)" (number of atoms 13)

Li Be B C N O F Ne Na Mg Si P Cl  
c. Basis Set "Core/val. Functions (cc-pCVQZ)" (number of atoms 13)  
Li Be B C N O F Ne Na Mg Si P Cl

## F. Penelitian Pendahuluan

Dalam penelitian ini akan dipelajari tentang mensintesis senyawa kompleks dari logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien menggunakan simulasi komputer program Gaussian dan Gammess. Berbagai penelitian yang telah dilakukan oleh tim peneliti pengusul (TPP) menyangkut pemakaian komputer dalam analisis sifat senyawa kimia dikemukakan dalam kajian terhadap Senyawaan Obat dengan Menggunakan program HyperChem 5,01 (Nugraha, 2004), kajian Mekanisme Reaksi Adisi antara Metileugenol dengan Asam Format (Nugraha dkk, 2005), kajian Struktur dan Aktivitas pada Feniletilamin menggunakan Metode Semi Empiris AM 1 (Nugraha, 2005), kajian sintesis dan karakterisasi senyawa kompleks melalui pendekatan komputasi kimia dan eksperimen (Nurmalis, 2007).

Penelitian yang telah dilakukan TPM adalah kajian teoritis terhadap senyawa kompleks  $[\text{Fe}(\text{en})_2(\text{NCS})_2]$  melalui reparameter fungsional densiti (Male, 2009). Quantum chemical studies of the pyrrole-water and pyridine-water complexes. (Martoprawiro, 1995). Ab initio quantum chemical and kinetic modeling study of the pyrolysis kinetics of pyrrole (Martoprawiro, 1999), Studi Teoretis Struktur Elektronik dan Sifat Transisi Spin Kompleks  $[\text{Fe}(\text{dpa})_2(\text{NCS})_2]$  (Male, 2009). Berdasar informasi yang diperoleh dari pihak tim peneliti mitra bahwa disamping penelitian dalam bidang senyawa kompleks juga dilakukan kajian terhadap senyawaan organik.

Penelitian yang akan dilakukan merupakan pengembangan dari penelitian yang telah dilakukan baik oleh TPP maupun TPM. Dalam penelitian ini akan dilakukan sintesis senyawa kompleks dari logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien menggunakan simulasi komputer dengan program NWCHEM. Dalam sintesis senyawa kompleks penentuan ligan yang tepat dilakukan berdasarkan prediksi berdasar data-data sifat senyawa yang akan berreraksi membentuk senyawa kompleks. Dalam penelitian ini akan dikembangkan sebuah metode sintesis senyawa kompleks dalam hal ini menggunakan logam Platina dengan berbagai ligan. Dalam penentuannya menggunakan simulasi komputer dengan program NWCHEM. Selama ini penentuan ligan yang tepat untuk logam tertentu dilakukan secara *trial and error* menggunakan berbagai data dan sifat kimia dari senyawaan kimia tersebut. Oleh karena itu perlu dilakukan kajian tentang penentuan sifat senyawa kompleks yang lebih akurat sehingga dalam penentuannya tidak berdasar *trial and error*

tetapi dilandasi dengan data kuantitatif yang lebih akurat. Metode simulasi komputer telah dimanfaatkan dalam berbagai penelitian diantaranya penentuan aktivitas senyawaan obat, kajian mekanisme reaksi, dan penentuan sifat senyawaan kompleks. Program komputer yang digunakan dalam penelitian-penelitian tersebut adalah HyperChem 5.01. Program aplikasi yang digunakan menggunakan berbagai perhitungan semi empiris seperti AM 1 maupun PM atau yang lainnya. Kualitas program komputer yang digunakan sangat ditentukan oleh variabel yang digunakan dalam perhitungan tersebut. Dalam penelitian ini yang telah digunakan di Jurusan Kimia ITB adalah program NWCHEM yang memiliki tingkat akurasi yang lebih tinggi dibanding dengan program HyperChem 5,01.

Dalam proses ekstraksi logam dari sampel alam, salah satu metode yang digunakan adalah melalui sintesis senyawa kompleks. Pembentukan senyawa kompleks dapat digunakan untuk memisahkan suatu logam dari logam pencampurnya. Melihat urgensi dari proses pembentukan senyawa kompleks maka berbagai penelitian menyangkut senyawa kompleks menjadi sangat penting terutama dalam pengembangan kimia anorganik. Dalam penelitian ini akan dilakukan kajian pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan beberapa jenis ligan untuk menentukan kestabilan senyawa kompleks dan mekanisme pembentukan senyawa kompleks. Penelitian ini merupakan kajian teoritis dengan simulasi komputer menggunakan program Gaussian dan Gammess. Penelitian ini dilakukan untuk menentukan data awal (prediksi) dalam melaksanakan sintesis senyawa kompleks di laboratorium.

Berbagai penelitian terdahulu tentang senyawa kompleks cukup banyak dilakukan peneliti terdahulu, diantaranya sintesis dan karakterisasi spektroskopi senyawa kompleks  $\text{Co}(\text{Bpy})^{2+}$  dan  $\text{Co}(\text{Phen})^{2+}$  (Sukro, 2003). Selain itu Bastian dan Sigel (1996) telah meneliti tentang konstanta stabilitas kompleks  $\text{Cu}(\text{Bpy})^{2+}$  dan  $\text{Cu}(\text{Phen})^{2+}$ , serta Bruckner (2004) telah meneliti kompleks dari Perak (II) dan (III) Porphyrin, Corroles, dan Carbaporphyrin. Kajian sintesis dan karakterisasi senyawa kompleks melalui pendekatan komputasi kimia dan eksperimen (Nurmalis, 2007), Male (2010) mempelajari tentang kajian teoritis dari senyawa kompleks  $[\text{Fe}(\text{en})_2(\text{NCS})_2]$  dengan reparameter fungsional densitas elektron.

## BAB III

### TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN

#### A. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk melakukan kajian teoritis pada proses pembentukan senyawa kompleks dari logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien. Secara spesifik kajian tersebut meliputi:

1. Menentukan keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
2. Menentukan mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
3. Menentukan kondisi reaksi yang paling optimal dalam pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
4. Menentukan jenis senyawa kompleks dari logam Platina yang paling stabil berdasarkan simulasi menggunakan program NWCHEM.

#### B. Manfaat Penelitian

Penelitian ini merupakan pengembangan teori dari reaksi antara logam Platina dengan berbagai jenis ligan dalam pembentukan senyawa kompleks. Teori yang mendasari penelitian ini menyangkut teori-teori kimia kuantum melalui program aplikasi kimia komputer. Hasil yang diperoleh dalam penelitian ini adalah data-data tentang karakteristik unsur dan senyawa, serta senyawa kompleks yang terbentuk yang meliputi: data keadaan transisi, mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks, kondisi reaksi yang paling optimal dalam pembentukan senyawa kompleks, dan jenis senyawa kompleks dari logam Platina yang paling stabil berdasarkan simulasi menggunakan program NWCHEM.

Keberhasilan penelitian ini akan memberikan kontribusi terhadap pengembangan sintesis senyawa-senyawa kompleks dari berbagai jenis logam. Hasil yang diperoleh dalam penelitian ini akan menambah wawasan tentang senyawa kompleks, terutama menyangkut sintesis senyawa kompleks melalui kajian teoritis. Kajian teoritis merupakan salah satu metode yang penelitian yang digunakan dalam kegiatan penelitian sehingga penelitian yang dilakukan memiliki data yang lebih akurat dan komprehensif tentang reaksi kimia yang akan diteliti. Pengetahuan teoritis maupun praktek di laboratorium akan memberikan kontribusi terhadap dunia industri terutama industri pengolahan logam. Dalam penelitian ini yang akan dikembangkan menyangkut metode maka hasil penelitian ini juga dapat dimanfaatkan dalam pengkajian unsur-unsur logam yang lainnya.

## BAB IV METODE PENELITIAN

### A. Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini telah dilaksanakan di Laboratorium Kimia FMIPA UNIMED Medan dan Laboratorium Kimia Fisika FMIPA ITB Bandung pada bulan Pebruari – September 2012.

### B. Alat yang digunakan

Alat alat yang digunakan adalah seperangkat alat komputer dengan software NWChem dan Server yang telah diinstall.

### C. Prosedur Kerja

Prosedur kerja meliputi dua tahap yaitu melalui studi komputasi Kimia dan studi eksperimen di Laboratorium.

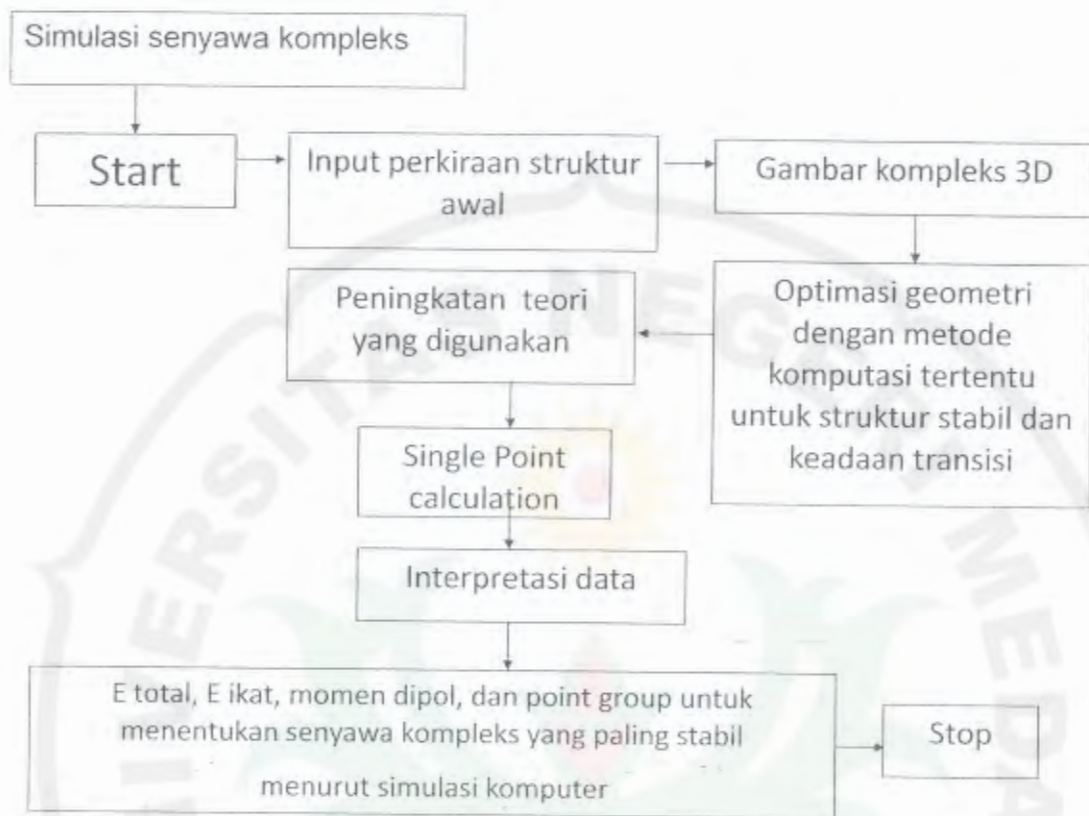
#### Studi Komputasi Kimia

Untuk menentukan data-data kestabilan, harga energi aktivasi keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks, dan menentukan data-data kestabilan senyawa kompleks yang terbentuk, mengikuti prosedur sebagai berikut:

- a. Membuat data input untuk molekul yang akan disimulasikan menggunakan z-matrix untuk menentukan geometri atom dalam molekul.
- b. Mengcopy file berupa data z-matrix ke computer yang telah ada nwchem.
- c. Membuka program pada server jika belum ada terminal yang membuka server.
- d. Memindahkan file dalam server ke tempat yang diinginkan.
- e. Untuk menjalankan program nwchem untuk senyawa yang diinginkan
- f. Untuk memastikan bahwa perhitungan telah selesai dengan melihat tulisan "Optimization Converged".

Berdasarkan hasil dari kajian komputasi kimia diperoleh data-data sehingga dapat ditentukan mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks dan menentukan senyawa kompleks yang paling stabil.

Secara skematis proses penelitian studi komputasi ini dapat digambarkan sebagai berikut:



Gambar 3.1 Diagram alir prosedur kerja studi komputasi

### Studi Eksperimen di Laboratorium

Berdasarkan hasil simulasi komputasi kimia diperoleh senyawa kompleks yang paling stabil. Sebelum dilakukan proses sintesa terlebih dahulu dilakukan penentuan rasio kompleks perak dengan ligan yang terbentuk.

#### 1. Penentuan Rasio Kompleks Perak dengan Ligan $[\text{Ag}(\text{L})_n]^+$ yang Terbentuk dengan Spektrofotometer UV

- Penentuan  $\lambda_{\text{maks}}$  dengan mengukur Absorbansi dari  $10^{-2}$  M larutan  $\text{Ag}^+$  ditambah dengan  $10^{-2}$  M ligan dengan rasio molekul logam berbanding ligan (1:1) pada berbagai panjang gelombang.  $\lambda_{\text{maks}}$  diperoleh berdasarkan harga Absorbansi yang paling tinggi.
- Penentuan stoikiometri senyawa kompleks yang terbentuk diukur pada  $\lambda_{\text{maks}}$  yang telah ditentukan sebelumnya dengan cara  $10^{-2}$  M larutan  $\text{Ag}^+$  ditambah dengan  $10^{-2}$  M ligan dengan rasio molekul logam berbanding ligan berturut-turut 1:1; 1:1,5; 1:2; 1:2,5; 1:3; 1:3,5; 1:4; 1:4,5 dan 1:5.
- Kemudian diukur Absorbansinya dengan spektrofotometer UV sehingga diperoleh data hubungan konsentrasi dengan Absorbansi.

d. Dari data yang diperoleh digunakan untuk menentukan rasio (perbandingan) mol atom logam dengan ligan yang terbentuk.

## 2. Sintesis Senyawa Kompleks $Ag(L)_n^+$

Berdasarkan perbandingan mol yang diperoleh maka disintesislah senyawa kompleks melalui prosedur berikut:

- Sebanyak 1,6987 gram  $AgNO_3$  dilarutkan dalam aquades hingga volume 100 ml.
- Setelah larut, kedalam larutan tersebut ditambahkan ligan (tetes demi tetes) dengan perbandingan mol sesuai dengan hasil penentuan stoikiometri rasio M:L.
- Larutan tersebut diaduk dengan magnetik stirrer, apabila mulai terbentuk kristal larutan tersebut dipanaskan pada Suhu  $\pm 100^\circ C$  hingga larutan hampir habis.
- Kristal yang diperoleh disaring dengan Buchner dan kertas saring Whatman.
- Kristal tersebut dibilas dengan sedikit aquades dan dikeringkan kemudian dimasukkan dalam desikator.

## 3. Karakterisasi Senyawa Kompleks yang Disintesis.

Kristal senyawa kompleks yang telah disintesis dilakukan suatu karakterisasi meliputi: Penentuan jumlah air kristal dan Penentuan daya hantar.

### • Penentuan air kristal.

- Dengan teliti cuplikan sampel (kristal hasil sintesis) ditimbang dengan berat tertentu didalam cawan penguapan.
- Cuplikan dikeringkan dalam oven pada suhu  $105^\circ C$ .
- Pada setengah jam pertama cuplikan ditimbang, penimbangan selanjutnya dilakukan setiap 15 menit sampai berat cuplikan konstan.

### • Penentuan daya hantar cuplikan dengan konduktometer.

- Larutkan senyawa kompleks yang telah disintesis kedalam aquades hingga konsentrasi 0,001 M dengan volume 25 ml.
  - Sel dibilas dengan aquades kemudian dilap dengan tissue.
- Suhu sel diatur pada suhu  $25^\circ C$ , kemudian konduktivitas sampel diukur.

## 2.4. Target/ Indikator Keberhasilan Penelitian

Dalam Pelaksanaan penelitian ini, target/ indikator keberhasilan yang harus dicapai adalah sebagai berikut: .

- Data-data kestabilan Perak dengan ligan-ligan  $NH_3$ ,  $Cl^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.

2. Harga energi aktivasi keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara Ag dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
3. Data-data kestabilan senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Ag dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
4. Mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
5. Kondisi reaksi yang paling optimal dalam pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.

#### **D. TARGET/ INDIKATOR KEBERHASILAN PENELITIAN**

Dalam Pelaksanaan penelitian ini, target/ indikator keberhasilan yang harus dicapai adalah sebagai berikut:

1. Data-data kestabilan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
2. Harga energi aktivasi keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara Pt dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
3. Data-data kestabilan senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Pt dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
4. Mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.
5. Kondisi reaksi yang paling optimal dalam pembentukan senyawa kompleks antara logam Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.



**BAB V**  
**HASIL DAN PEMBAHASAN**

**A. Hasil Penelitian**

Hasil perhitungan menggunakan program nwChem 6.0 diperoleh hasil yang dikemukakan pada tabel 5.1 dan 5.2.

Tabel 5.1. Data Hasil Perhitungan Energi menggunakan program nwChem 6.0

No.	Nama Senyawa	Besarnya Energi (HF)
1.	Platina	- 17.330,924
2.	NH <sub>3</sub>	- 56,083
3.	Pyridine	- 245,171
4.	dien	- 321,040
5.	en	- 189,963
6.	glim	- 306,826
7.	Cl	- 459,543
8.	Bipy	- 490,961
9.	[Pt(NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] <sup>2+</sup>	- 17.442,544
10.	[Pt(Pyr) <sub>2</sub> ] <sup>2+</sup>	- 17.821,265
11.	[Pt(dien)] <sup>2+</sup>	- 17.651,041
12.	[Pt(en) <sub>2</sub> ] <sup>2+</sup>	- 17.518,887
13.	[Pt(Cl) <sub>2</sub> ]	- 18.249,904
14.	[Pt(Cl) <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup>	- 19.168,885
15.	[Ptglim] <sup>2+</sup>	- 17.636,180
16.	[Pt(bipy)] <sup>2+</sup>	- 17.820,267

THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

Tabel 5.2. Data Hasil Perhitungan Energi menggunakan program nwChem 6.0

No.	Nama Senyawa	Besarnya Energi
1.	Perak	- 5.194,117
2.	NH <sub>3</sub>	- 56,083
3.	Pyridine	- 246,099
4.	dien	- 313,075
5.	en	- 188,865
6.	glim	- 306,027
7.	Ag(NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	- 5.306,466
8.	Ag(Pyr) <sub>2</sub>	- 5.686,504
9.	Agdien	- 5.038,197
10.	Ag(en) <sub>2</sub>	- 5.383,116

## B. Pembahasan

### 1. Metode perhitungan komputasi yang paling optimal dalam penentuan Energi unsur Ag, senyawa dari ligan-ligan NH<sub>3</sub>, Cl, en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien, dan senyawa kompleks yang terbentuk.

Rencana awal program yang akan digunakan dalam perhitungan energi unsur logam, ligan, dan senyawa kompleks adalah Program Gaussian dan Gammess. Dalam perjalanan pelaksanaan penelitian diputuskan program perhitungan yang akan digunakan adalah (NWChem) 6.0, karena program ini merupakan program yang *open-source* sehingga program ini dapat diinstall pada komputer di Unimed dan pemakaiannya lebih luas. Keputusan ini diambil dengan mempertimbangkan keberlanjutan pelaksanaan penelitian ini di Jurusan Kimia FMIPA Unimed.

Berikut ini dikemukakan hal-hal yang berkaitan dengan program Northwest Computational Chemistry Package (NWChem) 6.0.

Northwest Computational Chemistry Package (NWChem) 6.0

Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest National Laboratory  
 Richland, WA 99352 Copyright (c) 1994-2010 Pacific Northwest National Laboratory  
 Battelle Memorial Institute

NWChem is an *open-source* computational chemistry package distributed under the terms of the Educational Community License (ECL) 2.0. A copy of the license is included with this distribution in the LICENSE.TXT file ACKNOWLEDGMENT

This software and its documentation were developed at the EMSL at Pacific Northwest National Laboratory, a multiprogram national laboratory, operated for the U.S. Department of Energy by Battelle under Contract Number DE-AC05-76RL01830. Support for this work was provided by the Department of Energy Office of Biological and Environmental Research, Office of Basic Energy Sciences, and the Office of Advanced Scientific.

Dalam perhitungan Energi unsur, senyawa ligan dan senyawa kompleks dilakukan uji coba terhadap berbagai model perhitungan untuk menentukan model perhitungan yang paling optimal digunakan. Model perhitungan yang diujicoba, adalah:

1. Basis set standard untuk seluruh electron dalam unsur dan senyawa yang diamati, diantaranya:
  - a. Basis Set "STO-3G" (number of atoms 53)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I
  - b. Basis Set "WTBS" (number of atoms 84)  
He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe Cs Ba La Ce Pr Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn
2. Basis set Density functional specific diantaranya:
  - a. Basis Set "DZVP (DFT Orbital)" (number of atoms 54)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe.
3. Basis set Density functional Coulomb and Exchange fitting diantaranya:
  - a. Basis Set "DGauss A1 DFT Coulomb Fitting" (number of atoms 54)  
H He Li Be B C N O F Ne Na Mg Al Si P S Cl Ar K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe.

Pemilihan basis set yang diuji cobakan berdasarkan pertimbangan unsur-unsur yang diamati merupakan unsur-unsur yang dapat dihitung menggunakan basis set perhitungan tersebut. Berdasar hasil uji coba ternyata basis set perhitungan "wtbs" yang memberikan hasil perhitungan yang optimal. Sehingga set basis perhitungan tersebut digunakan untuk melakukan optimasi geometri dan menentukan besarnya energy dari unsur maupun senyawa kompleks.

## 2. Besarnya energi senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Pt dengan ligan NH<sub>3</sub>, Cl, en, glim, py, bpy, dan dien.

Berdasarkan hasil perhitungan yang dilakukan menggunakan program nwChem 6.0 dengan set basis perhitungan "wtbs" yang dikemukakan pada lampiran 1 dan lampiran 2. Pada lampiran 1 dikemukakan beberapa contoh input data perhitungan menggunakan program nwChem 6.0 dengan set basis perhitungan wtbs. Pada lampiran 2 dikemukakan beberapa contoh hasil perhitungan menggunakan program nwChem 6.0 dengan set basis perhitungan wtbs. Pada tabel 4.2 dikemukakan hasil perhitungan penentuan Energi senyawa kompleks.

Tabel 5.3. Data Hasil Perhitungan Energi senyawa kompleks menggunakan program nwChem 6.0

No.	Nama Senyawa Kompleks	Besarnya Energi (Ht)
1.	[Pt(NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] <sup>2+</sup>	- 17.442,544
2.	[Pt(Pyr) <sub>2</sub> ] <sup>2+</sup>	- 17.821,265
3.	[Ptdien] <sup>2+</sup>	- 17.651,041
4.	[Pt(en) <sub>2</sub> ] <sup>2+</sup>	- 17.518,887
5.	[Pt(Cl) <sub>2</sub> ]	- 18.249,904
6.	[Pt(Cl) <sub>4</sub> ] <sup>2-</sup>	- 19.168,885
7.	[Ptglim] <sup>2-</sup>	- 17.636,180
8.	[Ptbipy] <sup>2+</sup>	- 17.820,267

Berdasarkan data-data yang dikemukakan pada tabel 4.2 diperoleh bahwa besarnya energy senyawa kompleks [Pt(Cl)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> memiliki nilai paling rendah sebesar - 19.168,885 Ht. Hal ini menunjukkan bahwa senyawa kompleks tersebut merupakan senyawa kompleks yang paling stabil.

## 3. Besarnya perubahan energi pada proses pembentukan senyawa kompleks

Dalam penentuan besarnya energi pada proses pembentukan senyawa kompleks mengikuti persamaan reaksi sebagai berikut:



$$\Delta E = E(\text{Pt}(\text{NH}_3)_2) - (E(\text{Pt}) + 2E(\text{NH}_3))$$

Menggunakan persamaan stoikiometri dalam penentuan besarnya Energi pembentukan senyawa kompleks dikemukakan pada tabel 5.4.

Tabel 5.4. Harga Perubahan Energi dalam pembentukan senyawa kompleks

Nama Senyawa Kompleks	Besarnya Energi (HF)			Besarnya Perubahan Energi (HF)
	Platina	Ligan	Senyawa Kompleks	
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$	-17,330.924	-56.083	-17442.544	0.546
$[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$	-17,330.924	-245.171	-17821.265	0.001
$[\text{Pt}(\text{dien})]^{2+}$	-17,330.924	-321.040	-17651.041	0.923
$[\text{Pt}(\text{en})_2]^{2+}$	-17,330.924	-189.963	-17518.887	191.963
$[\text{Pt}(\text{Cl})_2]^{2+}$	-17,330.924	-459.543	-18249.904	0.106
$[\text{Pt}(\text{Cl})_4]^{2+}$	-17,330.924	-459.543	-19168.885	0.211
$[\text{Pt}(\text{glim})]^{2+}$	-17,330.924	-306.826	-17636.180	1.570
$[\text{Pt}(\text{bipy})]^{2+}$	-17,330.924	-490.961	-17820.267	1.618

#### 4. Penentuan senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk

Untuk menentukan senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk ditentukan berdasarkan harga perubahan energi pembentukan senyawa kompleks yang dikemukakan pada tabel 4.3. Harga perubahan energi pembentukan senyawa kompleks  $[\text{Pt}(\text{Cl})_2]^{2+}$  sebesar 0,106 HF, sedangkan harga perubahan energi pembentukan senyawa kompleks  $[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$  sebesar 0,01 HF. Berdasarkan data-data tersebut dapat disimpulkan bahwa senyawa kompleks  $[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$  merupakan senyawa yang paling mudah terbentuk karena harganya paling eksoterm.

#### 2. Hasil Penelitian Melalui Eksperimen di Laboratorium

##### 2.1. Untuk kompleks Perak-Pyridin

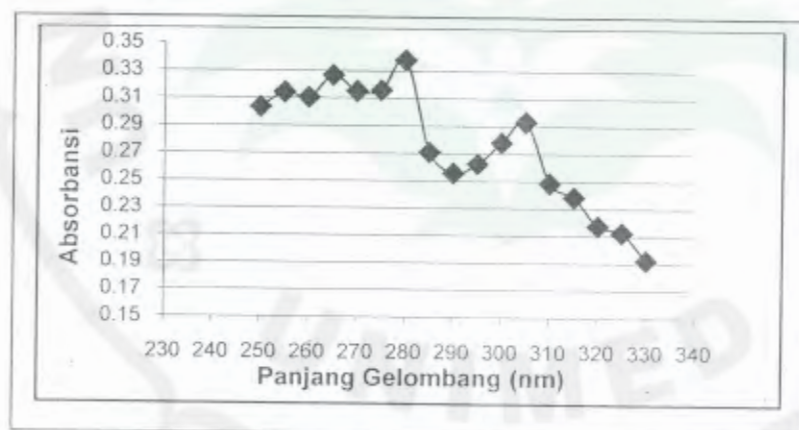
Karena kompleks Perak-Phenantrolin tidak terbentuk maka dilakukan sintesis Perak-Pyridin. Setelah dilakukan sintesis sesuai dengan prosedur diperoleh data sebagai berikut:

##### 2.1.1. Penentuan $\lambda_{\text{maks}}$

Dari penelitian yang dilakukan diperoleh data hubungan antara Absorbansi kompleks Perak-Pyridin dengan berbagai panjang gelombang. Dibawah ini disajikan tabel hasil pengukuran absorbansi kompleks Perak-pyridin dalam berbagai panjang gelombang.

Tabel 5.5. Hasil pengukuran absorbansi kompleks Perak-pyridin dalam berbagai panjang gelombang.

No	$\lambda$ (nm)	%T	A
1	250	49,7	0.3036
2	255	48,5	0.3142
3	360	48,9	0.3106
4	265	47,1	0.3269
5	270	48,4	0.3151
6	275	48,3	0.3160
7	<b>280</b>	<b>45,9</b>	<b>0.3381</b>
8	285	53,6	0.2708
9	290	55,5	0.2557
10	295	54,6	0.2628
11	300	52,7	0.2781
12	305	50,9	0.2932
13	310	56,4	0.2487
14	315	58,0	0.2365
15	320	60,6	0.2175
16	325	61,3	0.2125
17	330	62,2	0.1924



Gambar 5.1 Hubungan Absorbansi Senyawa Kompleks terhadap  $\lambda$  (nm)

## 2.1.2. Penentuan Rasio Kompleks Perak-Pyridin yang Terbentuk dengan Spektrofotometer UV

Dari hasil penelitian dalam penentuan Rasio Kompleks Perak-Pyridin yang Terbentuk dengan Spektrofotometer UV diperoleh data hubungan Absorbansi dengan perbandingan mol senyawa kompleks yang terbentuk. Data absorbansi dari perbandingan mol Perak-Pyridin diukur dengan Spektrofotometer UV pada panjang gelombang 280 nm. Berikut disajikan data absorbansi dari perbandingan mol Perak-Pyridin.

Tabel 5.6. Data absorbansi dari perbandingan M/L.

No	Perbandingan M/L	A <sub>1</sub>	A <sub>2</sub>
1	1 : 1	0,3382	0,3401
2	1 : 1,5	0,2856	0,2890
3	1 : 2	0,2740	0,2724
4	1 : 2,5	0,2284	0,2269
5	1 : 3	0,2373	0,2343
6	1 : 3,5	0,2269	0,2276
7	1 : 4	0,2240	0,2225
8	1 : 4,5	0,2034	0,2062
9	1 : 5	0,2048	0,2013

### 2 1. 3. Hasil Sintesis Senyawa Kompleks [Ag(py)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>

Berdasarkan hasil penentuan rasio (perbandingan) mol Perak dengan ligan Pyridin (1:2) maka disintesis senyawa kompleks sesuai dengan perbandingan tersebut. Reaksi antara senyawa ion logam perak dengan ligan pyridin dengan pereaksi (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub> menghasilkan larutan senyawa kompleks berwarna (kuning). Setelah larutan senyawa kompleks ini dipanaskan terbentuklah kristal kompleks yang berwarna putih. Larutan dan kristal hasil penelitian dapat dilihat pada lampiran 5 (dokumentasi penelitian).

### 2. 1. 4. Hasil Karakterisasi Senyawa Kompleks yang Telah Disintesa

#### Pengukuran Daya Hantar Cuplikan

Pengukuran daya hantar dilakukan dengan alat konduktometer type CG 859. Senyawa-senyawa yang telah disintesis dilarutkan dalam pelarut yang sesuai yaitu aquades sehingga konsentrasinya sekitar 10<sup>-3</sup> M, dengan hasil pengukuran sebagai berikut:

Tabel 5.7. Data hasil pengukuran daya hantar senyawa kompleks yang disintesis

No	Sampel	K (μS cm <sup>-1</sup> )
1	[Ag(Py) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> )]	126
2	[Ag(Py) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> )]	124
3	[Ag(Py) <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> )]	129

2. Penentuan besarnya Energi Aktivasi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.

### C. RENCANA PENELITIAN SELANJUTNYA

1. Hasil akhir dari dua tahun kegiatan penelitian ini adalah diperolehnya data-data tentang tingkat kestabilan senyawa kompleks yang terbentuk antara logam Perak dan Platina serta mekanisme reaksi pada proses pembentukan senyawa kompleks. Selain itu ada beberapa hal yang sangat penting bagi tim peneliti kimia teoritis Laboratorium Kimia Fisika UNIMED adalah telah terbangunnya perangkat software dan hardware yang mendukung pelaksanaan penelitian bidang kimia teori khususnya pemakaian program Gaussian dan Gammess. Dalam waktu dekat penelitian yang dilakukan dapat menggunakan jaringan yang telah dibangun melalui kegiatan penelitian kerjasama ini. Dengan mempergunakan perangkat yang telah dibangun maka kegiatan penelitian dapat dilakukan melalui jaringan internet ke laboratorium kimia teori Laboratorium Kimia Fisika ITB Bandung. Di masa-masa yang akan datang bila kelompok penelitian kimia teori makin berkembang maka lebih efisien bila memiliki program sendiri tanpa harus tergantung pada program di laboratorium Kimia Fisika ITB Bandung.
2. Dengan berbagai fasilitas yang telah dimiliki Laboratorium Kimia Fisika UNIMED dan pengalaman dalam melaksanakan penelitian kerjasama ini, maka mulai tahun 2013 sampai dengan 2015 dan seterusnya direncanakan akan melanjutkan penelitian sejenis dengan objek yang berbeda. Topik penelitian yang akan diajukan diantaranya adalah: kajian mekanisme reaksi pada reaksi fermentasi glukosa menjadi asam oksalat, reaksi antara metil eugenol dengan asam format, hidrocracking batu bara menjadi berbagai fraksi minyak bumi, reaksi pembentukan senyawa kompleks menggunakan logam dan ligan lainnya, dan beberapa reaksi-reaksi yang melibatkan senyawa organik dan senyawa anorganik lainnya. Penelitian-penelitian ini akan diajukan ke berbagai kompetisi hibah penelitian DIKTI maupun RISTEK seperti Penelitian Fundamental untuk pengembangan kajian dan Hibah Bersaing serta Hibah Strategi Nasional untuk penelitian yang menghasilkan produk. Hal yang lebih penting melalui berbagai upaya ini adalah terbangunnya budaya meneliti di Laboratorium Kimia Fisika UNIMED yang pada akhirnya dapat menghasilkan karya ilmiah di Jurnal Nasional maupun internasional dan produk penelitian lainnya.



## BAB VI

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil perhitungan dan analisis hasil perhitungan dapat dikemukakan beberapa kesimpulan sebagai berikut:

1. Metode perhitungan komputasi yang paling optimal dalam penentuan Energi unsur Pt, senyawa dari ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien, dan senyawa kompleks yang terbentuk adalah basis set perhitungan "wtbs".

2. Besarnya energi senyawa kompleks dapat dikemukakan sebagai berikut:

$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$	-	17.442,544
$[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$	-	17.821,265
$[\text{Pt}(\text{dien})]^{2+}$	=	17:651,041
$[\text{Pt}(\text{en})_2]^{2+}$	-	17.518,887
$[\text{Pt}(\text{Cl})_2]$	-	18.249,904
$[\text{Pt}(\text{Cl})_4]^{2-}$	-	19.168,885
$[\text{Ptglim}]^{2+}$	-	17.636,180
$[\text{Pt}(\text{bipy})]^{2+}$	-	17.820,267

3. Besarnya perubahan energi pada proses pembentukan senyawa kompleks dikemukakan sebagai berikut:

$\Delta H [\text{Pt}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$	0.546
$\Delta H [\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$	0.001
$\Delta H [\text{Pt}(\text{dien})]^{2+}$	0.923
$\Delta H [\text{Pt}(\text{en})_2]^{2+}$	191.963
$\Delta H [\text{Pt}(\text{Cl})_2]$	0.106
$\Delta H [\text{Pt}(\text{Cl})_4]^{2-}$	0.211
$\Delta H [\text{Ptglim}]^{2+}$	1.570
$\Delta H [\text{Pt}(\text{bipy})]^{2+}$	1.618

4. Senyawa kompleks yang paling mudah terbentuk adalah senyawa kompleks  $[\text{Pt}(\text{Pyr})_2]^{2+}$

#### B. Saran

Saran-saran yang diajukan menyangkut beberapa permasalahan yang belum dapat diselesaikan pada tahun pertama, yaitu:

1. Penentuan keadaan transisi pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam Perak dan Platina dengan ligan-ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien.

## DAFTAR PUSTAKA

- Arif, M.S. dan Susilawati, E., 1998, **Berkreasi dan Meneliti Dengan HyperChem Versi 5.01**, UGM Yogyakarta.
- Bastian M and Sigel H., 1997, Extent of Intramolecular Aromatic Ring Stacking in Ternary  $\text{Cu}^{2+}$  Complexes Formed by 2,2-bipyridin or 1,10 Phenantrolin and Flavin mononucleotide ( $\text{FM}^{2-}$ )<sup>1,2</sup>, *J Inorg. Chem*, Vol **36**, 1619–1624.
- Cotton dan Wilkinson, 1989, **Kimia Anorganik Dasar**, (Terjemahan Sahati Suharto), Universitas Indonesia Press, Jakarta
- Bignozzi C A, 1994, Vibration and electronic spectroscopy of electronically excited polychromophonic ruthenium (II) complexes, *J Inorg Chem*, **33**, 1652 -1659
- Bruckner, Christian, 2004, The Silver Complexes Of Porphyrins, Corroles, and Crba porphyrins: Silver in the oxidation states II and III, *J. Chem. Ed.*, Vol **81**, No 11, 1665–1669.
- Martoprawiro, M. A., & Bacskay, G. B. 1995. Quantum chemical studies of the pyrrole-water and pyridine-water complexes. *Molecular Physics*, 85(3), 573.
- Martoprawiro, M., Bacskay, G. B., & Mackie, J. C. 1999. Ab initio quantum chemical and kinetic modeling study of the pyrolysis kinetics of pyrrole. *The Journal of Physical Chemistry A*, 103(20), 3923–3934.
- Male Yusthinus T, Djulia Onggo, Muhamad A. Martoprawiro and Ismunandar. 2009. Theoretical Study Of The  $[\text{Fe}(\text{En})_2(\text{Ncs})_2]$  Complex With Reparameterized Density Functionals, *Indonesian Journal of Chemistry*, 9(3), 432-436.
- Male Yusthinus T, Djulia Onggo, Muhamad A. Martoprawiro and Ismunandar. 2009. Studi Teoretis Struktur Elektronik dan Sifat Transisi Spin Kompleks  $[\text{Fe}(\text{dpa})_2(\text{NCS})_2]$ . *Jurnal Matematika dan Sains*, 14(2), 89-95.
- Nugraha, A W. 2004. Kajian Kimia Kuantum terhadap turunan senyawa triptamin sebagai obat menggunakan program Hyper Chem 5,01. *J. Sainika Lemlit UNIMED*. Vol 4 (1) Maret, p 43 – 49.
- Nugraha, A W, Ratu Evina, dan J Purba, 2005. Kajian Mekanisme Reaksi Adisi Metileugenol dengan Asam Format Menghasilkan 1-(3,4-dimetoksi fenil-2-profil format dalam Upaya Pemanfaatan Minyak Cengkeh menjadi Bahan Baku Obat Hipertensi. LAPORAN PENELITIAN ILMU DASAR DIT JEN DIKTI, FMIPA UNIMED Medan
- Nugraha, A W, 2005. Hubungan Kuantitatif Antara Struktur dan Aktivitas pada Feniletilamin Tersubstitusi sebagai Perangsang Sistem Syaraf menggunakan Metode Semi Empiris AM 1. LAPORAN PENELITIAN PPD Heds, FMIPA UNIMED Medan.
- Normalis dan Nugraha, AW, 2009. Sintesis Dan Karakterisasi Senyawa Kompleks Antara Logam Perak Dengan Ligan-Ligan  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien Melalui Pendekatan Komputasi Kimia Dan Eksperimen, *Jurnal Sains Indonesia* Vol. **33** No. 1 Januari – Juni 2009
- Pranowo, Harno D. 2001. **Pemodelan Molekul**. Pusat Kimia Komputasi Indonesia- Austria Jurusan Kimia FMIPA Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.

Rode B M, Schwendinger MS., Kokpol SU., Hannongbua SV., Polman S., 1989, Quantum Pharmacological Studies on Antimalaria Drugs, *Momatshefte FurChemie*, **120**, 913 – 921.

Sukro dkk, 2003, Studi terhadap kompleks Kobalt – Phenantrolin dan Kobalt Bipiridin: Suatu Pendekatan Eksperimen dan Kimia Komputasi, *Teknosains*, Vol **16A**, 1, 1-7.

Vogel, 1990, **Buku Teks Analisis Anorganik Kualitatif Makro dan Semimikro**, 5<sup>th</sup> ed., Longman Group Ltd., London



THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

**Lampiran:****A. Ketua TPM**

Nama : **Muhamad A. Martoprawiro, Ph.D**

Bidang Keahlian : Kimia Fisika Teoritis

Instansi : Institut Teknologi Bandung

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Jurusan : Kimia

Laboratorium : Kimia Fisika (Kimia Teori)

**Publikasi Ilmiah:**

No	Karya Ilmiah
1	Quantum Chemical Study of pyrrole-water and pyridine-water complexes, <i>Molec. Phys.</i> <b>85</b> , 573-585 (1995)
2.	Ab Initio quantum chemical study of electronic structure and stability of the pyrrolyl radical: Comparison with the isoelectronic cyclopentadienyl radical, <i>Chem. Phys. Letters</i> , <b>290</b> , 391-398 (1998)
3.	The thermal decomposition of pyrrole: An ab initio quantum chemical study of the potential energy surface associated with the hydrogen cyanide plus propyne channel, <i>Chem. Phys. Letters</i> , <b>300</b> , 321-330 (1999)
4.	Ab Initio quantum chemical and kinetic modeling study of the pyrolysis kinetics of pyrrole, <i>J. Phys. Chem. A</i> , <b>103</b> , 3923-3934 (1999)
5.	Ab Initio Quantum Chemical and Kinetic Modelling Studies of Pyrolysis Kinetics, 3 <sup>rd</sup> Australian Conference on Physical Chemistry, 6 – 11 Feb 2000
6.	Studi Kimia Kuantum Tahap Awal Pirolisis TNTA menggunakan (Z)-1-azido-2-nitroetena dan 2-nitrofenil azida sebagai model, prosiding Seminar ITB-UKM VI, 2005
7.	Plane-wave density functional theory calculations for hydrogen adsorption on graphite, International Conference on Mathematics and natural Sciences (ICMNS), November 29 – 30, 2006. Bandung-Indonesia. p. 478 – 481.
8.	Quantum Chemical Study of Irradiated Free Radical Reactions of DNA Bases, Singapore International Chemistry Conference, 2007
9.	Ab Initio Quantum Chemical Study of The Thermal Decomposition of Aromatic Substituted N-acylhydrazones and N-thioacylhydrazones. International Joint Symposium on Computational Science, Japan, March 3 – 7 2008

**Seminar, Pelatihan, dan Lokakarya:**

1	Visi Pemanfaatan Teknologi Informasi dalam pengembangan Jaringan kerjasama disampaikan pada Seminar Regional Optimasi Sumberdaya dalam pelaksanaan jaringan kerjasama menyongsong otonomi, Proyek PSLPT & Universitas Jember 5 Pebruari 2000
2.	Pemanfaatan jaringan computer dalam peningkatan proses pendidikan dan penelitian disampaikan di Jurusan Kimia UNPAD, 3 November 2001
3.	Lokakarya pengembangan Jaringan Kerjasama Akademik berbasis computer FMIPA Universitas Jambi, 2002

4.	Lokakarya Pembelajaran Online FMIPA Universitas cendrawasih Irian jaya Desember 2003
5.	Lokakarya Sehari Pengembangan pembelajaran Kimia berbasis Web Jurusan Kimia FMIPA Universitas Hasanudin 23 Desember 2004
6.	Technical Assistance Kegiatan Pengembangan pembelajaran Berbasis IT/ ICT di Jurusan Kimia FMIPA UNIMED Medan 3 – 23 November 2008



THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

## BIODATA KETUA PENELITI TPP

1. Nama : **Drs. Asep Wahyu Nugraha, M. Si**
2. Tempat/ tanggal lahir : Bandung, 9 Juni 1967
3. Jenis kelamin : Laki-laki
4. Fakultas/ Jurusan : MIPA/ Kimia
5. Pangkat/ Golongan/ NIP : Pembina Tk I/ IV-b
6. Bidang Keahlian : Kimia Fisika
7. Alamat kantor : Jurusan Kimia FMIPA Univ. Negeri Medan  
Jl. Willem Iskandar Pasar V Medan Estate Medan
- Alamat rumah : Jl. Ki Hajar Dewantara No 8 Perumahan Dosen  
UNIMED Laut Dendang Percut Sei Tuan Deli Serdang
8. Riwayat Pendidikan dimulai dari yang terakhir:

No	Jenjang Pendidikan	Tempat	Tahun Selesai	Titel/ Ijazah	Bidang Spesialisasi
1	Pascasarjana (S-2)	UGM Yogyakarta	2000	M.Si	Kimia Fisika
2	Sarjana (S1)	IKIP Bandung	1991	Drs	Pendidikan Kimia

### 9. Penelitian yang pernah dibuat:

No	Judul Penelitian	Tugas dalam Penelitian	Pemberi dana/ Tahun
1	Pengaruh Jenis Pelarut dan Konsentrasi Larutan terhadap Kualitas Pernis dalam Pembuatan Pernis dari Bahan Baku kemenyan	Ketua Peneliti	Dana Rutin/ 2001
2	Kajian Termodinamika pada Interaksi antara Senyawa yang bersifat Polar-Non Polar dan Senyawa yang bersifat Non Polar-Non Polar	Ketua Peneliti	Lit mud DIKTI/ 2003
3	Kajian Kimia Kuantum terhadap Senyawaan Obat dengan Menggunakan program HyperChem 5.01	Ketua Peneliti	Dana Rutin/ 2003
4	Studi Kinetika Reaksi Autooksidasi lemak tak jenuh sebagai upaya peningkatan kualitas minyak kelapa sawit	Ketua Peneliti	Lit mud DIKTI/ 2004
5	Studi Kinetika Reaksi Fermentasi Molase menjadi Etanol dalam Upaya Pemanfaatan limbah Pabrik Gula	Anggota Peneliti	Lit mud DIKTI/ 2004
6	Kajian Mekanisme Reaksi Adisi Metileugenol dengan Asam Format Menghasilkan 1-(3,4-dimetoksi fenil)-2-profil format dalam Upaya Pemanfaatan Minyak Cengkeh menjadi Bahan Baku Obat Hipertensi.	Ketua Peneliti	Lit das DIKTI/ 2005
7	Hubungan Kuantitatif Antara Struktur dan Aktivitas pada Feniletilamin Tersubstitusi sebagai Perangsang Sistem Syaraf menggunakan Metode Semi Empiris AM I	Ketua Peneliti	PPD Heds/ 2005

8	Sintesis dan Karakterisasi Sifat Fisik dan Mekanik Keramik Hasil Campuran dengan Bahan Zeolit Alam Sebagai Alternatif Material Berkualitas Tinggi	Ketua Peneliti	Lit mud DIKTI/ 2006
9	Pengaruh waktu dan temperatur refluks terhadap produksi 1-(3,4-dimetoksi fenil-2-profil format) dari bahan metil eugenol dan asam format.	Ketua Peneliti	SPP/ DPP 2006
10	Kajian Fungsi-Fungsi Termodinamika Pada Interaksi Antara Senyawa-senyawa Elektrolit.	Ketua Peneliti	Lit mud DIKTI/ 2007
11	Pengaruh Waktu kontak dan Temperatur kontak Adsorben Zeolit dan Arang Aktif terhadap kualitas CPO Hasil Pemucatan	Anggota Peneliti	Dana Rutin/ 2007
12	Sintesis dan Karakterisasi Kompleks antara logam Perak dengan ligan-ligan $\text{NH}_3$ , $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien Melalui Pendekatan Komputasi Kimia dan Eksperimen.	Anggota Peneliti	Lit mud DIKTI/ 2007

#### 10. Artikel di Majalah

No	Judul Artikel	Majalah/ Jurnal
1	Fungsi-fungsi Termodinamika Ekses pada Campuran Biner Methanol-Asetonitril pada 298,15 K	Teknosains Pascasarjana UGM, 13 (3), September 2000
2	Pengaruh Jenis Pelarut dan Konsentrasi larutan dalam pembuatan Pernis dari Kemenyan Abu	Saintika Lemlit UNIMED, 2002
3	Kajian Kimia Kuantum terhadap turunan senyawa triptamin sebagai senyawa obat menggunakan program HyperChem 5.01	Saintika Lemlit UNIMED, Vol. 4 (1) Maret 2004
4	Evaluasi Jenis Kompleks Molekuler pada Campuran Biner Asetonitril-Metanol Melalui Pengukuran Tekanan Uap Total	J. Sains Indon MIPA UNIMED, Vol. 28 (2) April 2004
5	Pemanfaatan Kemenyan Abu dalam Pembuatan Pernis	J. Pengabdian Pada Masyarakat UNIMED, Vol 10 (36) Juni 2004
6	Studi Kinetika Reaksi Autooksidasi lemak tak jenuh sebagai upaya peningkatan kualitas minyak kelapa sawit	J. Sains Indon MIPA UNIMED, Vol. 29 (1) Jan - Mar 2005
7	Penerapan Model Praktikum Semi Riset Pada Praktikum Kimia Fisika 2	Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains, Vol 1, No 3 September 2006, ISSN: 1907-7157
8	Hubungan Kuantitatif Antara Struktur dan Aktivitas pada Fenil etilamin tersubstitusi sebagai perangsang sistem syaraf menggunakan metode Semi Empiris AM I	Jurnal Sains Indonesia, Vol 31, No 1 Januari - Juni 2007 ISSN: 1978-3841
9	Penerapan Metode Latihan Berstruktur Dalam Pengembangan Buku Ajar Kimia Fisika I	Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains, Vol 3, No 2 Oktober 2008 ISSN: 1907-7157

10	Pengaruh Waktu Dan Temperatur Kontak Adsorben Zeolit Dan Arang Aktif Terhadap Kualitas CPO Hasil Pemucatan	Jurnal Penelitian Saintika Vol.8 No. 2 Sepetember 2009 ISSN: 1412-2995
11	Kajian Termodinamika Pencampuran Pada Campuran Biner Benzena- Etanol	Jurnal Penelitian Saintika Vol.9 No. 2 Sepetember 2009 ISSN: 1412-2995
12	Sintesis Dan Karakterisasi Senyawa Kompleks Antara Logam Perak Dengan Ligan-Ligan $\text{NH}_3$ , $\text{Cl}^-$ , en, difos, glim, acac, py, bpy, dan dien Melalui Pendekatan Komputasi Kimia Dan Eksperimen	Jurnal Sains Indonesia Vol. 33 No. 1 Januari – Juni 2009 ISSN: 1978-3841 (Anggota)
13	Sintesis dan karakterisasi sifat fisik dan mekanik keramik hasil campuran dengan bahan zeolit alam sebagai alternatif material berkualitas tinggi	Jurnal Penelitian Saintika Vol.9 No. 2 Sepetember 2009 ISSN: 1412-2995 (Anggota)
14	Peningkatan Kompetensi dan Minat Mahasiswa terhadap matakuliah Dasar kimia Kuantum melalui pemakaian media pembelajaran berbasis IT/ ICT	Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains, Vol 4, No 2 Oktober 2009 ISSN: 1907-7157

Medan, September 2012

Drs. Asep Wahyu Nugraha, M.Si

NIP. 196706091992031001

THE  
*Character Building*  
 UNIVERSITY



## BIODATA ANGGOTA PENELITI 1 (TPP)

1. Nama : **Dra. Ratu Evina D, M. Si**  
 2. Tempat/ tanggal lahir : Yogyakarta, 22 Juni 1962  
 3. Jenis kelamin : Perempuan  
 4. Fakultas/ Jurusan : MIPA/ Kimia  
 5. Pangkat/ Golongan/ NIP : Pembina/ IV-a/ 196206221986032001  
 6. Bidang Keahlian : Kimia Organik  
 7. Alamat kantor : Jurusan Kimia FMIPA Univ. Negeri Medan  
 Jl. Willem Iskandar Pasar V Medan Estate Medan  
 Alamat rumah : Jl. Ekaresmi Komp. Bumi Johor Sentosa Blok D-10 Medan  
 Telp (061) 7861284

8. Riwayat Pendidikan dimulai dari yang terakhir:

No	Jenjang Pendidikan	Tempat	Tahun Selesai	Titel/ Ijazah	Bidang Spesialisasi
1	Pascasarjana (S-2)	USU Medan	1999	M.Si	Kimia Organik
2	Sarjana (S1)	IKIP Bandung	1984	Dra	Pendidikan Kimia

9. Penelitian yang pernah dibuat:

Tahun	Judul Penelitian	Jabatan	Sumber Dana
2005	Studi Biodegradasi Plastik Poliuretan dengan Bahan Baku Minyak Jarak Sebagai Plastik Ramah Lingkungan	Anggota	LITMUD
2006	Studi Awal Pembuatan Poliuretan Dari Campuran Minyak Jarak, Glikol dan Isosianat	Anggota	LITMUD
2007	Pengaruh Waktu dan Temperatur Kontak Adsorben Zeolit dan Arang Aktif Terhadap Kualitas CPO Hasil Pemucatan	Ketua	Dana Rutin
2007	Pembuatan dan Biodegradasi Plastik Berbahan Dasar Polistiren Untuk Mendapatkan Plastik Ramah Lingkungan	Ketua	DIKTI
2007	Pembelajaran Kimia Dasar Terintegrasi Berbasis Multimedia	Anggota	UNIMED
2008	Pembuatan Poliuretan dengan Bahan Baku Minyak Jarak Teralkoholisasi Sebagai Alternatif Bahan Perkat	Anggota	Hibah Bersaing
2009	Studi Pemanfaatan Ban Bekas (PostConsumer Rubber) Sebagai Filler dan Binder Pada Pencampuran Reaktif dengan Karet Alam (SIR-20) dan Nitrile Rubber	Ketua	Hibah Strategis Nasional

## 10. Artikel di Majalah

Tahun	Judul	Penerbit/Jurnal
2005	Kapasitas Serapan Ion Mangan oleh Biomassa Pada Silika Gel Hasil Sintesis dari Abu Sekam Padi.	Jurnal Penelitian SAINTIKA UNIMED Medan
2006	Prediksi Aktivitas Anti Oksidan Senyawa Turunan Flavon dan Flavonol dengan Metoda Analisis HKSA.	Jurnal Penelitian SAINTIKA UNIMED Medan
2007	Studi Proses Fermentasi Molase Menjadi Etanol Dalam Upaya Pemanfaatan Limbah Pabrik Gula	Jurnal Sains Indonesia FMIPA UNIMED Medan
2009	Sintesis dan Karakterisasi Sifat Fisik dan Mekanik Keramik Hasil Campuran dengan Bahan Zeolit Alam Sebagai Alternatif Material Berkualitas Tinggi	Jurnal Penelitian SAINTIKA UNIMED Medan
2010	Nobility of Teaching (Kemuliaan Mengajar)	Mentiko Publisher

Medan, September 2012  
Anggota Peneliti 1

**Dra. Ratu Evina D, M.Si**  
NIP. 196206221986032001

THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

## Input data Pyridine

```
title "Pyridine WTBS geometry optimization"
geometry
  zmatrix
N
C1 N 1.4
C2 C1 1.5 N 120.
C3 C2 1.5 C1 120. N 0.
C4 C3 1.5 C2 120. C1 0.
C5 C4 1.5 C3 120. C2 0.
H1 C1 1.0 N 120. C2 180.
H2 C2 1.0 C1 120. N 180.
H3 C3 1.0 C2 120. C1 180.
H4 C4 1.0 C3 120. C2 180.
H5 C5 1.0 C4 120. C3 180.
  end
end
basis
  N library WTBS
  C library WTBS
  H library cc-pvdz
end
task dft energy
end
```

UNIVERSITAS NEGERI MEDAN  
UNIMED

THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

## Hasil perhitungan Pyridine

argument 1 = Piridine-wtbs.nw

Northwest Computational Chemistry Package (NWChem) 6.0

---

Environmental Molecular Sciences Laboratory  
Pacific Northwest National Laboratory  
Richland, WA 99352

Copyright (c) 1994-2010  
Pacific Northwest National Laboratory  
Battelle Memorial Institute

NWChem is an open-source computational chemistry package distributed under the terms of the Educational Community License (ECL) 2.0. A copy of the license is included with this distribution in the LICENSE.TXT file

### ACKNOWLEDGMENT

---

This software and its documentation were developed at the EMSL at Pacific Northwest National Laboratory, a national laboratory, operated for the U.S. Department of Energy by Battelle under Contract Number DE-AC05-76RL01830. Support for this work was provided by the Department of Energy Office of Biological and Environmental Research, Office of Basic Energy Sciences, and the Office of Advanced Scientific Computing.

### Job information

---

hostname = localhost  
program = nwchem  
date = Wed Jul 11 12:17:55 2012  
compiled = Thu Nov 24 22:41:49 2011  
source = /home/localuser/opt/nwchem  
nwchem branch = Development  
input = Piridine-wtbs.nw  
prefix = Piridine-wtbs.  
data base = ./Piridine-wtbs.db  
status = startup  
nproc = 1  
time left = -1s

Memory information

-----  
heap = 13107201 doubles = 100.0 Mbytes  
stack = 13107201 doubles = 100.0 Mbytes  
global = 26214400 doubles = 200.0 Mbytes (distinct from heap  
& stack)  
total = 52428802 doubles = 400.0 Mbytes  
verify = yes  
hardfail = no

Directory information

-----  
0 permanent = .  
-0 scratch = .

NWChem Input Module

-----  
Pyridine cc-pvdz SCF geometry optimization

ncenter= 11

Scaling coordinates for geometry "geometry" by 1.889725989  
(inverse scale = 0.529177249)

CS symmetry detected

-----  
Geometry "geometry" -> ""  
-----

Output coordinates in angstroms (scale by 1.889725989 to convert to  
a.u.)

No.	Tag	Charge	X	Y
1	N	7.0000	1.35901835	-0.59583967
0.00000000				
2	C1	6.0000	0.27275964	-1.47903954
0.00000000				
3	C2	6.0000	-1.12867202	-0.94425986
0.00000000				
4	C3	6.0000	-1.36625506	0.53680540
0.00000000				
5	C4	6.0000	-0.20240644	1.48309098
0.00000000				

6 C5	6.0000	1.19902522	0.94831130
0.00000000			
7 H1	1.0000	0.43114833	-2.46641638
0.00000000			
8 H2	1.0000	-1.90457110	-1.57511691
0.00000000			
9 H3	1.0000	-2.30054283	0.89332518
0.00000000			
10 H4	1.0000	-0.36079514	2.47046781
0.00000000			
11 H5	1.0000	1.97492429	1.57916835
0.00000000			

Atomic Mass

---

N	14.003070
C1	12.000000
C2	12.000000
C3	12.000000
C4	12.000000
C5	12.000000
H1	1.007825
H2	1.007825
H3	1.007825
H4	1.007825
H5	1.007825

Effective nuclear repulsion energy (a.u.) 193.9505007099

Nuclear Dipole moment (a.u.)

---

X	Y	Z
-----	-----	-----
-0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000

Symmetry information

---

Group name	Cs
Group number	2
Group order	2
No. of unique centers	11

Symmetry unique atoms

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----

Z-matrix (user)

---

Units are Angstrom for bonds and degrees for angles

Type	Name	I	J	K	L	M	Value
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

1	Stretch	2	1			1.40000
2	Stretch	3	2			1.50000
3	Bend	3	2	1		120.00000
4	Stretch	4	3			1.50000
5	Bend	4	3	2		120.00000
6	Torsion	4	3	2	1	0.00000
7	Stretch	5	4			1.50000
8	Bend	5	4	3		120.00000
9	Torsion	5	4	3	2	0.00000
10	Stretch	6	5			1.50000
11	Bend	6	5	4		120.00000
12	Torsion	6	5	4	3	0.00000
13	Stretch	7	2			1.00000
14	Bend	7	2	1		120.00000
15	Torsion	7	2	1	3	180.00000
16	Stretch	8	3			1.00000
17	Bend	8	3	2		120.00000
18	Torsion	8	3	2	1	180.00000
19	Stretch	9	4			1.00000
20	Bend	9	4	3		120.00000
21	Torsion	9	4	3	2	180.00000
22	Stretch	10	5			1.00000
23	Bend	10	5	4		120.00000
24	Torsion	10	5	4	3	180.00000
25	Stretch	11	6			1.00000
26	Bend	11	6	5		120.00000
27	Torsion	11	6	5	4	180.00000

XYZ format geometry

```

11
geometry
N      1.35901835   -0.59583967   0.00000000
C1     0.27275964   -1.47903954   0.00000000
C2    -1.12867202   -0.94425986   0.00000000
C3    -1.36625506    0.53680540   0.00000000
C4    -0.20240644    1.48309098   0.00000000
C5     1.19902522    0.94831130   0.00000000
H1     0.43114833   -2.46641638   0.00000000
H2    -1.90457110   -1.57511691   0.00000000
H3    -2.30054283    0.89332518   0.00000000
H4    -0.36079514    2.47046781   0.00000000
H5     1.97492429    1.57916835   0.00000000

```

internuclear distances

```

-----
center one | center two | atomic units |
angstroms
-----

```

```

2 C1 | 1 N | 2.64562 |
1.40000

```

3 C2		2 C1		2.83459	
1.50000					
4 C3		3 C2		2.83459	
1.50000					
5 C4		4 C3		2.83459	
1.50000					
6 C5		1 N		2.93364	
1.55242					
6 C5		5 C4		2.83459	
1.50000					
7 H1		2 C1		1.88973	
1.00000					
8 H2		3 C2		1.88973	
1.00000					
9 H3		4 C3		1.88973	
1.00000					
10 H4		5 C4		1.88973	
1.00000					
11 H5		6 C5		1.88973	
1.00000					

-----  
number of included internuclear distances: 11  
-----

RHF ENERGY GRADIENTS

atom	coordinates			gradient	
	x	y	z	x	y
z					
1 N	2.604442	-0.993358	0.000000	0.000106	0.000026
0.000000					
2 C1	0.497467	-2.585500	0.000000	-0.000108	0.000059
0.000000					
3 C2	-2.081077	-1.688273	0.000000	0.000083	0.000053
0.000000					
4 C3	-2.541809	0.992729	0.000000	0.000042	-0.000081
0.000000					
5 C4	-0.399337	2.669216	0.000000	0.000032	-0.000040
0.000000					
6 C5	2.113441	1.601334	0.000000	-0.000081	-0.000024
0.000000					
7 H1	0.911544	-4.576155	0.000000	0.000007	-0.000045
0.000000					
8 H2	-3.614105	-3.023553	0.000000	-0.000056	0.000001
0.000000					
9 H3	-4.440187	1.725098	0.000000	-0.000049	0.000002
0.000000					
10 H4	-0.637327	4.688244	0.000000	-0.000016	0.000035
0.000000					
11 H5	3.757669	2.797424	0.000000	0.000040	0.000012
0.000000					

-----

Time	1-e(secs)		2-e(secs)	
CPU	0.13		300.90	
WALL	0.12		301.54	

-----



3 C2		2 C1		2.83459	
1.50000					
4 C3		3 C2		2.83459	
1.50000					
5 C4		4 C3		2.83459	
1.50000					
6 C5		1 N		2.93364	
1.55242					
6 C5		5 C4		2.83459	
1.50000					
7 H1		2 C1		1.88973	
1.00000					
8 H2		3 C2		1.88973	
1.00000					
9 H3		4 C3		1.88973	
1.00000					
10 H4		5 C4		1.88973	
1.00000					
11 H5		6 C5		1.88973	
1.00000					

-----  
number of included internuclear distances: 11  
-----

RHF ENERGY GRADIENTS

atom	coordinates			gradient	
	x	y	z	x	y
z					
1 N	2.604442	-0.993358	0.000000	0.000106	0.000026
0.000000					
2 C1	0.497467	-2.585500	0.000000	-0.000108	0.000059
0.000000					
3 C2	-2.081077	-1.688273	0.000000	0.000083	0.000053
0.000000					
4 C3	-2.541809	0.992729	0.000000	0.000042	-0.000081
0.000000					
5 C4	-0.399337	2.669216	0.000000	0.000032	-0.000040
0.000000					
6 C5	2.113441	1.601334	0.000000	-0.000081	-0.000024
0.000000					
7 H1	0.911544	-4.576155	0.000000	0.000007	-0.000045
0.000000					
8 H2	-3.614105	-3.023553	0.000000	-0.000056	0.000001
0.000000					
9 H3	-4.440187	1.725098	0.000000	-0.000049	0.000002
0.000000					
10 H4	-0.637327	4.688244	0.000000	-0.000016	0.000035
0.000000					
11 H5	3.757669	2.797424	0.000000	0.000040	0.000012
0.000000					

	Time		1-e(secs)		2-e(secs)	
	CPU		0.13		300.90	
	WALL		0.12		301.54	

```

-----
Step      Energy      Delta E      Gmax      Grms      Xrms      Xmax
Walltime
-----
@ 9      -246.45267951 -6.6D-07    0.00010   0.00004   0.00056   0.00150
6021.3

```

```

ok      ok      ok      ok

```

Z-matrix (user)

Units are Angstrom for bonds and degrees for angles

Type	Name	I	J	K	L	M	Value
Gradient							
1 Stretch		2	1				1.39749
0.00010							
2 Stretch		3	2				-1.44475
-0.00001							
3 Bend		3	2	1			123.73758
0.00006							
4 Stretch		4	3				1.43952
-0.00009							
5 Bend		4	3	2			118.93686
0.00005							
6 Torsion		4	3	2	1		0.00000
-0.00000							
7 Stretch		5	4				1.43959
-0.00003							
8 Bend		5	4	3			118.29215
-0.00004							
9 Torsion		5	4	3	2		0.00000
-0.00000							
10 Stretch		6	5				1.44480
-0.00003							
11 Bend		6	5	4			118.93225
-0.00005							
12 Torsion		6	5	4	3		0.00000
-0.00000							
13 Stretch		7	2				1.07596
0.00005							
14 Bend		7	2	1			115.32607
0.00000							
15 Torsion		7	2	1	3		180.00000
-0.00000							
16 Stretch		8	3				1.07582
0.00004							
17 Bend		8	3	2			119.75810
0.00004							
18 Torsion		8	3	2	1		180.00000
0.00000							

19 Stretch	9	4				1.07674
0.00005						
20 Bend	9	4	3			120.84701
-0.00002						
21 Torsion	9	4	3	2		180.00000
-0.00000						
22 Stretch	10	5				1.07582
0.00004						
23 Bend	10	5	4			121.32058
-0.00001						
24 Torsion	10	5	4	3		180.00000
-0.00000						
25 Stretch	11	6				1.07595
0.00004						
26 Bend	11	6	5			120.94154
0.00002						
27 Torsion	11	6	5	4		180.00000
0.00000						

-----  
 Optimization converged  
 -----

Step	Energy	Delta E	Gmax	Grms	Xrms	Xmax
Walltime						
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
6 9	-246.45267951	-6.6D-07	0.00010	0.00004	0.00056	0.00150
6021.3			ok	ok	ok	ok

Z-matrix (user)  
 -----

Units are Angstrom for bonds and degrees for angles

Type	Name	I	J	K	L	M	Value
Gradient							
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1 Stretch		2	1				1.39749
0.00010							
2 Stretch		3	2				1.44475
-0.00001							
3 Bend		3	2	1			123.73758
0.00006							
4 Stretch		4	3				1.43952
-0.00009							
5 Bend		4	3	2			118.93686
0.00005							
6 Torsion		4	3	2	1		0.00000
-0.00000							
7 Stretch		5	4				1.43959
-0.00003							

8 Bend	5	4	3		118.29215
-0.00004					
9 Torsion	5	4	3	2	0.00000
-0.00000					
10 Stretch	6	5			1.44480
-0.00003					
11 Bend	6	5	4		118.93225
-0.00005					
12 Torsion	6	5	4	3	0.00000
-0.00000					
13 Stretch	7	2			1.07596
0.00005					
14 Bend	7	2	1		115.32607
0.00000					
15 Torsion	7	2	1	3	180.00000
-0.00000					
16 Stretch	8	3			1.07582
0.00004					
17 Bend	8	3	2		119.75810
0.00004					
18 Torsion	8	3	2	1	180.00000
0.00000					
19 Stretch	9	4			1.07674
0.00005					
20 Bend	9	4	3		120.84701
-0.00002					
21 Torsion	9	4	3	2	180.00000
-0.00000					
22 Stretch	10	5			1.07582
0.00004					
23 Bend	10	5	4		121.32058
-0.00001					
24 Torsion	10	5	4	3	180.00000
-0.00000					
25 Stretch	11	6			1.07595
0.00004					
26 Bend	11	6	5		120.94154
0.00002					
27 Torsion	11	6	5	4	180.00000
0.00000					

Geometry "geometry" -> "geometry"

Output coordinates in angstroms (scale by 1.889725989 to convert to a.u.)

No.	Tag	Charge	X	Y
1	N	7.0000	1.37821142	-0.52566224
2	C1	6.0000	0.26324825	-1.36818778

3 C2	6.0000	-1.10125841	-0.89339586
0.00000000			
4 C3	6.0000	-1.34506738	0.52532953
0.00000000			
5 C4	6.0000	-0.21132000	1.41248816
0.00000000			
6 C5	6.0000	1.11838505	0.84738977
0.00000000			
7 H1	1.0000	0.48236846	-2.42159699
0.00000000			
8 H2	1.0000	-1.91250230	-1.59999542
0.00000000			
9 H3	1.0000	-2.34964614	0.91288238
0.00000000			
10 H4	1.0000	-0.33725891	2.48091187
0.00000000			
11 H5	1.0000	1.98847320	1.48033324
0.00000000			

Atomic Mass

---

N	14.003070
C1	12.000000
C2	12.000000
C3	12.000000
C4	12.000000
C5	12.000000
H1	1.007825
H2	1.007825
H3	1.007825
H4	1.007825
H5	1.007825

Effective nuclear repulsion energy (a.u.) 199.6853404682

Nuclear Dipole moment (a.u.)

---

X	Y	Z
-0.2591961492	0.5945878333	0.0000000000

Symmetry information

---

Group name	Cs
Group number	2
Group order	2
No. of unique centers	11

Symmetry unique atoms

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----

Final and change from initial internal coordinates

---

## Z-matrix (user)

Units are Angstrom for bonds and degrees for angles

Change	Type	Name	I	J	K	L	M	Value
-0.00251	1 Stretch		2	1				1.39749
-0.05525	2 Stretch		3	2				1.44475
3.73758	3 Bend		3	2	1			123.73758
-0.06048	4 Stretch		4	3				1.43952
-1.06314	5 Bend		4	3	2			118.93686
0.00000	6 Torsion		4	3	2	1		0.00000
-0.06041	7 Stretch		5	4				1.43959
-1.70785	8 Bend		5	4	3			118.29215
0.00000	9 Torsion		5	4	3	2		0.00000
-0.05520	10 Stretch		6	5				1.44480
-1.06775	11 Bend		6	5	4			118.93225
0.00000	12 Torsion		6	5	4	3		0.00000
0.07596	13 Stretch		7	2				1.07596
-4.67393	14 Bend		7	2	1			115.32607
0.00000	15 Torsion		7	2	1	3		180.00000
0.07583	16 Stretch		8	3				1.07582
-0.24190	17 Bend		8	3	2			119.75810
0.00000	18 Torsion		8	3	2	1		180.00000
0.07674	19 Stretch		9	4				1.07674
0.84701	20 Bend		9	4	3			120.84701
0.00000	21 Torsion		9	4	3	2		180.00000
0.07582	22 Stretch		10	5				1.07582
1.32058	23 Bend		10	5	4			121.32058

24 Torsion	10	5	4	3	180.00000
0.00000					
25 Stretch	11	6			1.07595
0.07595					
26 Bend	11	6	5		120.94154
0.94154					
27 Torsion	11	6	5	4	180.00000
0.00000					

internuclear distances

center one angstroms	center two	atomic units
2 C1	1 N	2.64088
1.39749		
3 C2	2 C1	2.73018
1.44475		
4 C3	3 C2	2.72030
1.43952		
5 C4	4 C3	2.72044
1.43959		
6 C5	1 N	2.64074
1.39742		
6 C5	5 C4	2.73028
1.44480		
7 H1	2 C1	2.03326
1.07596		
8 H2	3 C2	2.03301
1.07583		
9 H3	4 C3	2.03475
1.07674		
10 H4	5 C4	2.03301
1.07582		
11 H5	6 C5	2.03325
1.07595		

number of included internuclear distances:

11

internuclear angles

degrees	center 1	center 2	center 3
116.36	2 C1	1 N	6 C5
123.74	1 N	2 C1	3 C2
115.33	1 N	2 C1	7 H1
120.94	3 C2	2 C1	7 H1
118.94	2 C1	3 C2	4 C3
119.76	2 C1	3 C2	8 H2
121.31	4 C3	3 C2	8 H2
118.29	3 C2	4 C3	5 C4
120.85	3 C2	4 C3	9 H3
120.86	5 C4	4 C3	9 H3
118.93	4 C3	5 C4	6 C5
121.32	4 C3	5 C4	10 H4
119.75	6 C5	5 C4	10 H4
123.74	1 N	6 C5	5 C4
115.32	1 N	6 C5	11 H5
120.94	5 C4	6 C5	11 H5

number of included internuclear angles:

16

Task times cpu: 6008.0s wall: 6021.1s  
 Summary of allocated global arrays

No active global arrays

GA Statistics for process 0



```

      create   destroy   get       put       acc       scatter   gather
read&inc
calls: 5678      5678      2.40e+05 6.92e+04 1.38e+05    0         0
0
number of processes/call 1.00e+00 1.00e+00 1.00e+00 0.00e+00 0.00e+00
bytes total:          1.77e+08 1.15e+08 4.41e+07 0.00e+00 0.00e+00
0.00e+00
bytes remote:        0.00e+00 0.00e+00 0.00e+00 0.00e+00 0.00e+00
0.00e+00
Max memory consumed for GA by this process: 354888 bytes
MA_summarize_allocated_blocks: starting scan ...
MA_summarize_allocated_blocks: scan completed: 0 heap blocks, 0 stack
blocks
MA usage statistics:

```

allocation statistics:

	heap	stack
	----	----
current number of blocks		0
maximum number of blocks		29
current total bytes		0
maximum total bytes	13679604	55009460
maximum total K-bytes	13680	55010
maximum total M-bytes	14	56

NWChem Input Module

#### CITATION

Please cite the following reference when publishing results obtained with NWChem:

M. Valiev, E.J. Bylaska, N. Govind, K. Kowalski, T.P. Straatsma, H.J.J. van Dam, D. Wang, J. Nieplocha, E. Apra, T.L. Windus, W.A. de Jong

"NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations"

Comput. Phys. Commun. 181, 1477 (2010)

doi:10.1016/j.cpc.2010.04.018

#### AUTHORS & CONTRIBUTORS

E. J. Bylaska, W. A. de Jong, N. Govind, K. Kowalski, T. P. Straatsma,

M. Valiev, H. J. J. van Dam, D. Wang, E. Apra, T. L. Windus, J. Hammond,

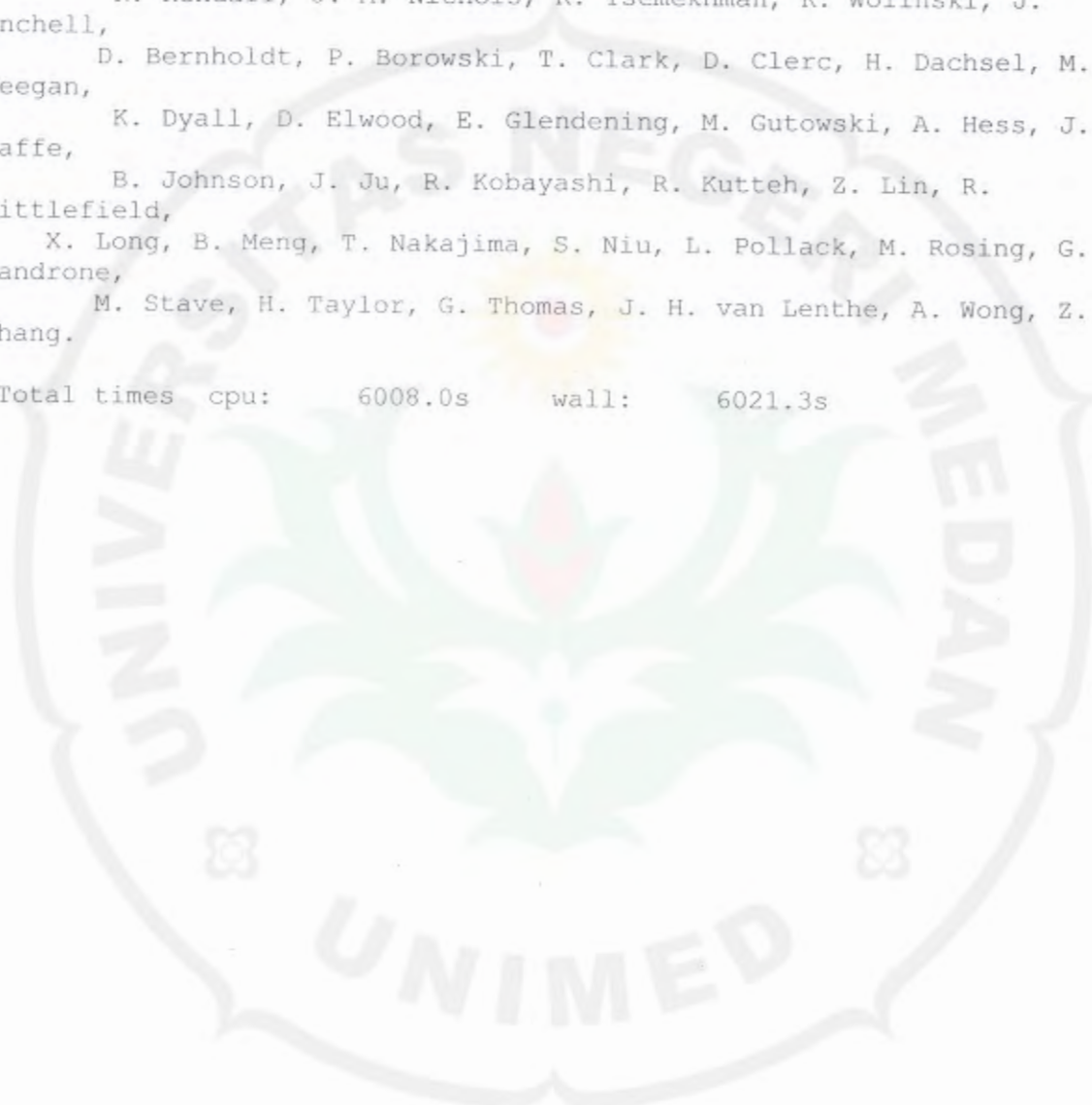
J. Autschbach, F. Aquino, J. Mullin, P. Nichols, S. Hirata, M. T. Hackler,

Y. Zhao, P.-D. Fan, R. J. Harrison, M. Dupuis, D. M. A. Smith, K. Glaesemann,

J. Nieplocha, V. Tipparaju, M. Krishnan, A. Vazquez-Mayagoitia, L. Jensen,

M. Swart, Q. Wu, T. Van Voorhis, A. A. Auer, M. Nooijen, L. D. Crosby,  
E. Brown, G. Cisneros, G. I. Fann, H. Fruchtl, J. Garza, K. Hirao,  
R. Kendall, J. A. Nichols, K. Tsemekhman, K. Wolinski, J. Anchell,  
D. Bernholdt, P. Borowski, T. Clark, D. Clerc, H. Dachsel, M. Deegan,  
K. Dyall, D. Elwood, E. Glendening, M. Gutowski, A. Hess, J. Jaffe,  
B. Johnson, J. Ju, R. Kobayashi, R. Kutteh, Z. Lin, R. Littlefield,  
X. Long, B. Meng, T. Nakajima, S. Niu, L. Pollack, M. Rosing, G. Sandrone,  
M. Stave, H. Taylor, G. Thomas, J. H. van Lenthe, A. Wong, Z. Zhang.

Total times cpu: 6008.0s wall: 6021.3s



THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

## Hasil Perhitungan Ptpyr

argument 1 = Ptpyr2wtbs9.nw

Northwest Computational Chemistry Package (NWChem) 6.0

---

Environmental Molecular Sciences Laboratory  
Pacific Northwest National Laboratory  
Richland, WA 99352

Copyright (c) 1994-2010  
Pacific Northwest National Laboratory  
Battelle Memorial Institute

NWChem is an open-source computational chemistry package distributed under the terms of the Educational Community License (ECL) 2.0. A copy of the license is included with this distribution in the LICENSE.TXT file

### ACKNOWLEDGMENT

---

This software and its documentation were developed at the EMSL at Pacific Northwest National Laboratory, a multiprogram national laboratory, operated for the U.S. Department of Energy by Battelle under Contract Number DE-AC05-76RL01830. Support for this work was provided by the Department of Energy Office of Biological and Environmental Research, Office of Basic Energy Sciences, and the Office of Advanced Scientific Computing.

### Job information

---

hostname = localhost  
program = nwchem  
date = Tue Jul 31 16:49:07 2012  
compiled = Thu Nov 24 22:41:49 2011  
source = /home/localuser/opt/nwchem  
nwchem branch = Development  
input = Ptpyr2wtbs9.nw  
prefix = Ptpyr2wtbs9.  
data base = ./Ptpyr2wtbs9.db  
status = startup  
nproc = 1  
time left = -1s

Memory information

-----  
heap = 13107201 doubles = 100.0 Mbytes  
stack = 13107201 doubles = 100.0 Mbytes  
global = 26214400 doubles = 200.0 Mbytes (distinct from heap  
& stack)  
total = 52428802 doubles = 400.0 Mbytes  
verify = yes  
hardfail = no

Directory information

-----  
0 permanent = .  
0 scratch = .

NWChem Input Module

-----  
PtPyr2 WTBS geometry optimization

ncenter= 23

Scaling coordinates for geometry "geometry" by 1.889725989  
(inverse scale = 0.529177249)

CS symmetry detected

-----  
Geometry "geometry" -> ""  
-----

Output coordinates in angstroms (scale by 1.889725989 to convert to  
a.u.)

No.	Tag	Charge	X	Y
1	N1	7.0000	0.07396738	1.07650926
0.00000000				
2	C11	6.0000	1.26349288	1.81477011
0.00000000				
3	C21	6.0000	1.21571799	3.31400910
0.00000000				
4	C31	6.0000	-0.10654851	4.02225433
0.00000000				
5	C41	6.0000	-1.38104012	3.23126056
0.00000000				

6 C51	6.0000	-1.33326522	1.73202157
0.00000000			
7 H11	1.0000	2.14500389	1.34260662
0.00000000			
8 H21	1.0000	2.06537907	3.84133828
0.00000000			
9 H31	1.0000	-0.13839843	5.02174699
0.00000000			
10 H41	1.0000	-2.26255112	3.70342405
0.00000000			
11 H51	1.0000	-2.18292630	1.20469239
0.00000000			
12 Pt	78.0000	0.13129725	-0.72257753
0.00000000			
13 N2	7.0000	0.18862712	-2.52166433
0.00000000			
14 C12	6.0000	-0.81086554	-2.55351425
0.00000000			
15 C22	6.0000	-1.60185931	-1.27902265
0.00000000			
16 C32	6.0000	-0.89361408	0.04324385
0.00000000			
17 C42	6.0000	0.60562491	0.09101875
0.00000000			
18 C52	6.0000	1.39661868	-1.18347286
0.00000000			
19 H12	1.0000	-1.28302903	-3.43502525
0.00000000			
20 H22	1.0000	-2.60135197	-1.31087257
0.00000000			
21 H32	1.0000	-1.42094326	0.89290493
0.00000000			
22 H42	1.0000	1.07778840	0.97252975
0.00000000			
23 H52	1.0000	2.39611134	-1.15162294
0.00000000			

Atomic Mass

N1	14.003070
C11	12.000000
C21	12.000000
C31	12.000000
C41	12.000000
C51	12.000000
H11	1.007825
H21	1.007825
H31	1.007825
H41	1.007825
H51	1.007825
Pt	194.964800
N2	14.003070
C12	12.000000
C22	12.000000
C32	12.000000
C42	12.000000
C52	12.000000

H12 1.007825  
H22 1.007825  
H32 1.007825  
H42 1.007825  
H52 1.007825

General Information

-----  
SCF calculation type: DFT  
Wavefunction type: closed shell.  
No. of atoms : 23  
No. of electrons : 158  
Alpha electrons : 79  
Beta electrons : 79  
Charge : 4  
Spin multiplicity: 1  
Use of symmetry is: on ; symmetry adaption is: on  
Maximum number of iterations: 30  
AO basis - number-of-functions: 156  
number of shells: 80  
Convergence on energy requested: 1.00D-06  
Convergence on density requested: 1.00D-05  
Convergence on gradient requested: 5.00D-04

XC Information

-----  
Slater Exchange Functional 1.000 local  
VWN V Correlation Functional 1.000 local

Grid Information

-----  
Grid used for XC integration: medium  
Radial quadrature: Mura-Knowles  
Angular quadrature: Lebedev.

Tag	B.-S.	Rad.	Rad. Pts.	Rad. Cut.	Ang. Pts.
N1	0.65	49	13.0	434	
C11	0.70	49	14.0	434	
C21	0.70	49	16.0	434	
C31	0.70	49	17.0	434	
C41	0.70	49	16.0	434	
C51	0.70	49	14.0	434	
H11	0.35	45	14.0	434	
H21	0.35	45	17.0	434	
H31	0.35	45	19.0	434	
H41	0.35	45	16.0	434	
H51	0.35	45	13.0	434	
Pt	1.35	123	14.0	590	
N2	0.65	49	17.0	434	
C12	0.70	49	17.0	434	
C22	0.70	49	15.0	434	
C32	0.70	49	13.0	434	
C42	0.70	49	13.0	434	
C52	0.70	49	15.0	434	
H12	0.35	45	19.0	434	
H22	0.35	45	16.0	434	
H32	0.35	45	12.0	434	

H42	0.35	45	12.0	434
H52	0.35	45	15.0	434

Grid pruning is: on  
 Number of quadrature shells: 1161  
 Spatial weights used: Erf1

Convergence Information

---

Convergence aids based upon iterative change in total energy or number of iterations.  
 Levelshifting, if invoked, occurs when the HOMO/LUMO gap drops below (HL\_TOL): 1.00D-02  
 DIIS, if invoked, will attempt to extrapolate using up to (NFOCK): 10 stored Fock matrices.

	Damping( 0%)	Levelshifting(0.5)	DIIS
dE on:	start	ASAP	start
dE off:	2 iters	30 iters	30 iters

Screening Tolerance Information

---

Density screening/tol\_rho: 1.00D-10  
 AO Gaussian exp screening on grid/accAOfunc: 14  
 CD Gaussian exp screening on grid/accCDfunc: 20  
 XC Gaussian exp screening on grid/accXCfunc: 20  
 Schwarz screening/accCoul: 1.00D-08

Superposition of Atomic Density Guess

---

Sum of atomic energies: -17821.26513628

THE  
*Character Building*  
 UNIVERSITY

Input Data Platina

```
title "Pt WTBS geometry optimization"
geometry
  zmatrix
  Pt
end
end
basis
  Pt library WTBS
end
charge 2
task dft energy
end
```

Data Hasil Perhitungan Platina

```
argument 1 = Ptwlbs5.nwl
```

-----  
Northwest Computational Chemistry Package (NWChem) 6.0

Environmental Molecular Sciences Laboratory  
Pacific Northwest National Laboratory  
Richland, WA 99352

Copyright (c) 1994-2010  
Pacific Northwest National Laboratory  
Battelle Memorial Institute

NWChem is an open-source computational chemistry package  
distributed under the terms of the  
Educational Community License (ECL) 2.0  
A copy of the license is included with this distribution  
in the LICENSE.TXT file

#### ACKNOWLEDGMENT

-----

This software and its documentation were developed at the  
EMSL at Pacific Northwest National Laboratory, a  
multiprogram national laboratory, operated for the U.S. Department of  
Energy by Battelle under Contract Number DE-AC05-76RL01830.  
Support for this work was provided by the Department of Energy  
Office of Biological and Environmental Research, Office of Basic  
Energy Sciences, and the Office of Advanced Scientific  
Computing.



Job information

-----  
hostname = localhost  
program = nwchem  
date = Thu Aug 2 09:32:46 2012  
  
compiled = Thu Nov 24 22:41:49 2011  
source = /home/localuser/opt/nwchem  
nwchem branch = Development  
input = Ptwbts5.nw1  
prefix = Ptwbts5.  
data base = ./Ptwbts5.db  
status = startup  
nproc = 1  
time left = -1s

-----  
Memory information

-----  
heap = 13107201 doubles = 100.0 Mbytes  
stack = 13107201 doubles = 100.0 Mbytes  
global = 26214400 doubles = 200.0 Mbytes (distinct from heap  
& stack)  
total = 52428802 doubles = 400.0 Mbytes  
verify = yes  
hardfail = no

-----  
Directory information

0 permanent = .  
0 scratch = .

NWChem Input Module

-----  
Pt WTBS geometry optimization

ncenter= 1

Scaling coordinates for geometry "geometry" by 1.889725989  
(inverse scale = 0.529177249)

Geometry "geometry" -> ""

-----  
Output coordinates in angstroms (scale by 1.889725989 to convert to  
a.u.)

No. Tag Charge X Y

z -----

1 Pt 78.0000 0.00000000 0.00000000  
0.00000000

Atomic Mass

Pt 194.964800

Effective nuclear repulsion energy (a.u.) 0.0000000000

Nuclear Dipole moment (a.u.)

X

Y

Z

0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000

XYZ format geometry

1

geometry

Pt 0.00000000 0.00000000 0.00000000

Basis "ao basis" -> "" (cartesian)

Pt (Platinum)

Exponent Coefficients

1 S	9.70691510E+07	0.000002
1 S	2.03231100E+07	0.000013
1 S	4.87683320E+06	0.000071
1 S	1.32885570E+06	0.000327
1 S	4.06753550E+05	0.001306
1 S	1.38201160E+05	0.004560
1 S	5.14638230E+04	0.014118
1 S	2.07334110E+04	0.038856
1 S	8.92271410E+03	0.094107
1 S	4.05300810E+03	0.192966
1 S	1.92216280E+03	0.307374
1 S	9.42758480E+02	0.318020
1 S	4.74360050E+02	0.154960
1 S	2.43244190E+02	0.019497
1 S	1.26450040E+02	0.001175
1 S	6.63699520E+01	-0.000680
1 S	3.50649750E+01	0.000481
1 S	1.86061970E+01	-0.000417
1 S	9.90010600E+00	0.000316
1 S	5.27658710E+00	-0.000228
1 S	2.81507880E+00	0.000168
1 S	1.50265600E+00	-0.000121
1 S	8.02316790E-01	0.000085
1 S	4.28436130E-01	-0.000057
1 S	2.28795840E-01	0.000036
1 S	1.22184900E-01	-0.000020
1 S	6.52512590E-02	0.000008

1 S	3.48466130E-02	-0.000002
2 S	9.70691510E+07	0.000001
2 S	2.03231100E+07	0.000004
2 S	4.87683320E+06	0.000024
2 S	1.32885570E+06	0.000109
2 S	4.06753550E+05	0.000435
2 S	1.38201160E+05	0.001525
2 S	5.14638230E+04	0.004765
2 S	2.07334110E+04	0.013383
2 S	8.92271410E+03	0.033941
2 S	4.05300810E+03	0.076334
2 S	1.92216280E+03	0.145994
2 S	9.42758480E+02	0.205750
2 S	4.74360050E+02	0.121260
2 S	2.43244190E+02	-0.257925
2 S	1.26450040E+02	-0.584291
2 S	6.63699520E+01	-0.326385
2 S	3.50649750E+01	-0.034383
2 S	1.86061970E+01	-0.002660
2 S	9.90010600E+00	0.001775
2 S	5.27658710E+00	-0.001062
2 S	2.81507880E+00	0.000841
2 S	1.50265600E+00	-0.000613
2 S	8.02316790E-01	0.000420
2 S	4.28436130E-01	-0.000287
2 S	2.28795840E-01	0.000180
2 S	1.22184900E-01	-0.000099
2 S	6.52512590E-02	0.000042
2 S	3.48466130E-02	-0.000010
3 S	9.70691510E+07	0.000000
3 S	2.03231100E+07	0.000002
3 S	4.87683320E+06	0.000011
3 S	1.32885570E+06	0.000051
3 S	4.06753550E+05	0.000206
3 S	1.38201160E+05	0.000722
3 S	5.14638230E+04	0.002261
3 S	2.07334110E+04	0.006367
3 S	8.92271410E+03	0.016272
3 S	4.05300810E+03	0.037109
3 S	1.92216280E+03	0.073188
3 S	9.42758480E+02	0.108844
3 S	4.74360050E+02	0.070751
3 S	2.43244190E+02	-0.189591
3 S	1.26450040E+02	-0.591605
3 S	6.63699520E+01	-0.402728
3 S	3.50649750E+01	0.638190
3 S	1.86061970E+01	0.716503
3 S	9.90010600E+00	0.116804
3 S	5.27658710E+00	0.017763
3 S	2.81507880E+00	-0.008703
3 S	1.50265600E+00	0.006645
3 S	8.02316790E-01	-0.004987
3 S	4.28436130E-01	0.003378
3 S	2.28795840E-01	-0.002162
3 S	1.22184900E-01	0.001199
3 S	6.52512590E-02	-0.000509

3 S	3.48466130E-02	0.000120
4 S	9.70691510E+07	0.000000
4 S	2.03231100E+07	0.000001
4 S	4.87683320E+06	0.000006
4 S	1.32885570E+06	0.000025
4 S	4.06753550E+05	0.000102
4 S	1.38201160E+05	0.000357
4 S	5.14638230E+04	0.001121
4 S	2.07334110E+04	0.003152
4 S	8.92271410E+03	0.008088
4 S	4.05300810E+03	0.018449
4 S	1.92216280E+03	0.036815
4 S	9.42758480E+02	0.055090
4 S	4.74360050E+02	0.037591
4 S	2.43244190E+02	-0.105961
4 S	1.26450040E+02	-0.349519
4 S	6.63699520E+01	-0.282353
4 S	3.50649750E+01	0.629774
4 S	1.86061970E+01	0.973297
4 S	9.90010600E+00	-0.289746
4 S	5.27658710E+00	-0.948039
4 S	2.81507880E+00	-0.318702
4 S	1.50265600E+00	-0.008214
4 S	8.02316790E-01	-0.008134
4 S	4.28436130E-01	0.003711
4 S	2.28795840E-01	-0.002526
4 S	1.22184900E-01	0.001362
4 S	6.52512590E-02	-0.000578
4 S	3.48466130E-02	0.000137
5 S	9.70691510E+07	-0.000000
5 S	2.03231100E+07	-0.000000
5 S	4.87683320E+06	-0.000002
5 S	1.32885570E+06	-0.000011
5 S	4.06753550E+05	-0.000043
5 S	1.38201160E+05	-0.000150
5 S	5.14638230E+04	-0.000470
5 S	2.07334110E+04	-0.001320
5 S	8.92271410E+03	-0.003396
5 S	4.05300810E+03	-0.007729
5 S	1.92216280E+03	-0.015514
5 S	9.42758480E+02	-0.023135
5 S	4.74360050E+02	-0.016199
5 S	2.43244190E+02	0.046115
5 S	1.26450040E+02	0.151700
5 S	6.63699520E+01	0.131506
5 S	3.50649750E+01	-0.317091
5 S	1.86061970E+01	-0.503306
5 S	9.90010600E+00	-0.171851
5 S	5.27658710E+00	0.900223
5 S	2.81507880E+00	0.428818
5 S	1.50265600E+00	-0.644585
5 S	8.02316790E-01	-0.680469
5 S	4.28436130E-01	-0.221346
5 S	2.28795840E-01	-0.003776
5 S	1.22184900E-01	-0.006916
5 S	6.52512590E-02	0.002784

5 S	3.48466130E-02	-0.000677
6 S	9.70691510E+07	0.000000
6 S	2.03231100E+07	0.000000
6 S	4.87683320E+06	0.000001
6 S	1.32885570E+06	0.000003
6 S	4.06753550E+05	0.000011
6 S	1.38201160E+05	0.000039
6 S	5.14638230E+04	0.000122
6 S	2.07334110E+04	0.000343
6 S	8.92271410E+03	0.000883
6 S	4.05300810E+03	0.002008
6 S	1.92216280E+03	0.004038
6 S	9.42758480E+02	0.006007
6 S	4.74360050E+02	0.004245
6 S	2.43244190E+02	-0.012097
6 S	1.26450040E+02	-0.039559
6 S	6.63699520E+01	-0.034952
6 S	3.50649750E+01	0.085289
6 S	1.86061970E+01	0.134474
6 S	9.90010600E+00	-0.044519
6 S	5.27658710E+00	-0.275408
6 S	2.81507880E+00	-0.126501
6 S	1.50265600E+00	0.238776
6 S	8.02316790E-01	0.346365
6 S	4.28436130E-01	0.179990
6 S	2.28795840E-01	-0.026900
6 S	1.22184900E-01	-0.425164
6 S	6.52512590E-02	-0.396349
6 S	3.48466130E-02	-0.363686
7 P	4.06753550E+05	0.000008
7 P	1.38201160E+05	0.000037
7 P	5.14638230E+04	0.000200
7 P	2.07334110E+04	0.000886
7 P	8.92271410E+03	0.003520
7 P	4.05300810E+03	0.012430
7 P	1.92216280E+03	0.038859
7 P	9.42758480E+02	0.104819
7 P	4.74360050E+02	0.227265
7 P	2.43244190E+02	0.352784
7 P	1.26450040E+02	0.311187
7 P	6.63699520E+01	0.112435
7 P	3.50649750E+01	0.009515
7 P	1.86061970E+01	0.000465
7 P	9.90010600E+00	-0.000326
7 P	5.27658710E+00	0.000104
7 P	2.81507880E+00	-0.000092
7 P	1.50265600E+00	0.000060
7 P	8.02316790E-01	-0.000030
7 P	4.28436130E-01	0.000015
7 P	2.28795840E-01	-0.000004
8 P	4.06753550E+05	-0.000004
8 P	1.38201160E+05	-0.000019
8 P	5.14638230E+04	-0.000101
8 P	2.07334110E+04	-0.000446
8 P	8.92271410E+03	-0.001783

8 P	4.05300810E+03	-0.006343
8 P	1.92216280E+03	-0.020259
8 P	9.42758480E+02	-0.056569
8 P	4.74360050E+02	-0.130077
8 P	2.43244190E+02	-0.216127
8 P	1.26450040E+02	-0.162439
8 P	6.63699520E+01	0.205683
8 P	3.50649750E+01	0.562608
8 P	1.86061970E+01	0.337236
8 P	9.90010600E+00	0.051220
8 P	5.27658710E+00	0.004514
8 P	2.81507880E+00	-0.001100
8 P	1.50265600E+00	0.000792
8 P	8.02316790E-01	-0.000525
8 P	4.28436130E-01	0.000221
8 P	2.28795840E-01	-0.000062
9 P	4.06753550E+05	0.000002
9 P	1.38201160E+05	0.000009
9 P	5.14638230E+04	0.000049
9 P	2.07334110E+04	0.000219
9 P	8.92271410E+03	0.000875
9 P	4.05300810E+03	0.003125
9 P	1.92216280E+03	0.010011
9 P	9.42758480E+02	0.028242
9 P	4.74360050E+02	0.065749
9 P	2.43244190E+02	0.111634
9 P	1.26450040E+02	0.078399
9 P	6.63699520E+01	-0.161688
9 P	3.50649750E+01	-0.465794
9 P	1.86061970E+01	-0.172439
9 P	9.90010600E+00	0.492607
9 P	5.27658710E+00	0.571008
9 P	2.81507880E+00	0.167342
9 P	1.50265600E+00	0.012295
9 P	8.02316790E-01	0.001132
9 P	4.28436130E-01	0.000148
9 P	2.28795840E-01	-0.000019



THE  
*Character Building*  
UNIVERSITY

8 P	4.05300810E+03	-0.006343
8 P	1.92216280E+03	-0.020259
8 P	9.42758480E+02	-0.056569
8 P	4.74360050E+02	-0.130077
8 P	2.43244190E+02	-0.216127
8 P	1.26450040E+02	-0.162439
8 P	6.63699520E+01	0.205683
8 P	3.50649750E+01	0.562608
8 P	1.86061970E+01	0.337236
8 P	9.90010600E+00	0.051220
8 P	5.27658710E+00	0.004514
8 P	2.81507880E+00	-0.001100
8 P	1.50265600E+00	0.000792
8 P	8.02316790E-01	-0.000525
8 P	4.28436130E-01	0.000221
8 P	2.28795840E-01	-0.000062
9 P	4.06753550E+05	0.000002
9 P	1.38201160E+05	0.000009
9 P	5.14638230E+04	0.000049
9 P	2.07334110E+04	0.000219
9 P	8.92271410E+03	0.000875
9 P	4.05300810E+03	0.003125
9 P	1.92216280E+03	0.010011
9 P	9.42758480E+02	0.028242
9 P	4.74360050E+02	0.065749
9 P	2.43244190E+02	0.111634
9 P	1.26450040E+02	0.078399
9 P	6.63699520E+01	-0.161688
9 P	3.50649750E+01	-0.465794
9 P	1.86061970E+01	-0.172439
9 P	9.90010600E+00	0.492607
9 P	5.27658710E+00	0.571008
9 P	2.81507880E+00	0.167342
9 P	1.50265600E+00	0.012295
9 P	8.02316790E-01	0.001132
9 P	4.28436130E-01	0.000148
9 P	2.28795840E-01	-0.000019
10 P	4.06753550E+05	0.000001
10 P	1.38201160E+05	0.000004
10 P	5.14638230E+04	0.000019
10 P	2.07334110E+04	0.000086
10 P	8.92271410E+03	0.000341
10 P	4.05300810E+03	0.001222
10 P	1.92216280E+03	0.003913
10 P	9.42758480E+02	0.011075
10 P	4.74360050E+02	0.025826
10 P	2.43244190E+02	0.044118
10 P	1.26450040E+02	0.030393
10 P	6.63699520E+01	-0.069196
10 P	3.50649750E+01	-0.204307
10 P	1.86061970E+01	-0.057977
10 P	9.90010600E+00	0.288529
10 P	5.27658710E+00	0.406572
10 P	2.81507880E+00	-0.035446
10 P	1.50265600E+00	-0.491869
10 P	8.02316790E-01	-0.467306



*Building*

10 P	4.28436130E-01	-0.173349
10 P	2.28795840E-01	-0.033457
11 D	8.92271410E+03	0.000088
11 D	4.05300810E+03	0.000334
11 D	1.92216280E+03	0.001743
11 D	9.42758480E+02	0.007392
11 D	4.74360050E+02	0.027501
11 D	2.43244190E+02	0.085709
11 D	1.26450040E+02	0.206600
11 D	6.63699520E+01	0.349779
11 D	3.50649750E+01	0.349183
11 D	1.86061970E+01	0.155801
11 D	9.90010600E+00	0.025628
11 D	5.27658710E+00	0.001553
11 D	2.81507880E+00	0.000279
11 D	1.50265600E+00	-0.000038
11 D	8.02316790E-01	0.000026
11 D	4.28436130E-01	-0.000025
11 D	2.28795840E-01	0.000007
11 D	1.22184900E-01	-0.000004
12 D	8.92271410E+03	-0.000044
12 D	4.05300810E+03	-0.000172
12 D	1.92216280E+03	-0.000884
12 D	9.42758480E+02	-0.003813
12 D	4.74360050E+02	-0.014218
12 D	2.43244190E+02	-0.045341
12 D	1.26450040E+02	-0.110868
12 D	6.63699520E+01	-0.185426
12 D	3.50649750E+01	-0.135697
12 D	1.86061970E+01	0.160490
12 D	9.90010600E+00	0.435392
12 D	5.27658710E+00	0.394149
12 D	2.81507880E+00	0.145093
12 D	1.50265600E+00	0.021026
12 D	8.02316790E-01	0.001272
12 D	4.28436130E-01	0.000495
12 D	2.28795840E-01	-0.000011
12 D	1.22184900E-01	0.000069
13 D	8.92271410E+03	0.000013
13 D	4.05300810E+03	0.000052
13 D	1.92216280E+03	0.000267
13 D	9.42758480E+02	0.001160
13 D	4.74360050E+02	0.004311
13 D	2.43244190E+02	0.013840
13 D	1.26450040E+02	0.033844
13 D	6.63699520E+01	0.056677
13 D	3.50649750E+01	0.037683
13 D	1.86061970E+01	-0.066823
13 D	9.90010600E+00	-0.163115
13 D	5.27658710E+00	-0.137687
13 D	2.81507880E+00	0.072949
13 D	1.50265600E+00	0.297327
13 D	8.02316790E-01	0.356658
13 D	4.28436130E-01	0.292061
13 D	2.28795840E-01	0.144567

NEGERI MEDAN

IMED

Building



```

13 D 1.22184900E-01 0.060691
14 F 9.42758480E+02 0.000185
14 F 4.74360050E+02 0.000762
14 F 2.43244190E+02 0.003895
14 F 1.26450040E+02 0.016356
14 F 6.63699520E+01 0.053428
14 F 3.50649750E+01 0.137098
14 F 1.86061970E+01 0.251897
14 F 9.90010600E+00 0.320290
14 F 5.27658710E+00 0.291535
14 F 2.81507880E+00 0.178548
14 F 1.50265600E+00 0.066556
14 F 8.02316790E-01 0.017970

```

XC Information

```

-----
Slater-Exchange Functional 1.000 local
VWN V Correlation Functional 1.000 local

```

Grid Information

```

-----
Grid used for XC integration: medium
Radial quadrature: Mura-Knowles
Angular quadrature: Lebedev.
Tag          B.-S. Rad. Rad. Pts. Rad. Cut. Ang. Pts.
-----
Pt          1.35          123          8.0          590
Grid pruning is: on
Number of quadrature shells: 123
Spatial weights used: Erf1

```

Convergence Information

```

-----
Convergence aids based upon iterative change in
total energy or number of iterations.
Levelshifting, if invoked, occurs when the
HOMO/LUMO gap drops below (HL_TOL): 1.00D-02
DIIS, if invoked, will attempt to extrapolate
using up to (NFOCK): 10 stored Fock matrices.

```

```

-----
Damping( 0%) Levelshifting(0.5) DIIS
de on: start ASAP start
de off: 2 iters 30 iters 30 iters

```

Screening Tolerance Information

```

-----
Density screening/tol_rho: 1.00D-10
AO Gaussian exp screening on grid/accAOfunc: 14
CD Gaussian exp screening on grid/accCDfunc: 20
XC Gaussian exp screening on grid/accXCfunc: 20
Schwarz screening/accCoul: 1.00D-08
Superposition of Atomic Density Guess

```

```

-----
Sum of atomic energies: -17330.92375550

```