PROSIDING

SEMINAR NASIONAL KIMIA DAN PENDIDIKAN KIMIA #2 2021

"Peran Strategis Kimia Dan Pendidikan Kimia Terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan Dan Teknologi Dalam Revolusi 4.0 Di Era New Normal"

11 DESEMBER 2021

Penerbit FMIPA Universitas Negeri Medan

ISBN: 978-602-9115-73-4

Prosiding
Seminar Nasional Kimia Dan Pendidikan Kimia #2

"Peran Strategis Kimia Dan Pendidikan Kimia Terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan Dan Teknologi Dalam Revolusi 4.0 Di Era New Normal"

Diselenggarakan oleh:
Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Medan

Gedung Syawal Gultom lt. 3
FMIPA UNIMED
(*Virtual Conference*)

11 Desember 2021

Penerbit FMIPA Universitas Negeri Medan

Prosiding
Seminar Nasional Kimia Dan Pendidikan Kimia #2

Penanggung Jawab :
Prof. Dr. Fauziyah Harahap, M.Si
Dr. Jamalum Purba, M.Si
Dr. Ayi Darmana, M.Si

Dewan Redaksi :
Dr. Ani Sutiani, M.Si
Drs. Jasmidi, M.Si
Dr. Zainuddin Muchtar, M.Si
Dr. Ahmad Nasir Pulungan, M.Sc

Reviewer :
Prof. Manihar Situmorang, M.Sc, Ph.D
Prof. Dr. Retno Dwi Suyanti, M.Si
Prof. Dr. Ida Duma Riris, M.Si
Prof. Dr. Ramlan Silaban, MS
Dr. Asep Wahyu Nugraha, M.Si
Dr. Iis Siti Jahro, M.Si
Dr. Destria Roza, M.Si
Dr. Junifa Laila Sihombing, M.Sc
Dr. Lisnawaty Simatupang, M.Si
Dr. Herlinawati, M.Si
Nora Susanti, S.Si., Apt., M.Sc
Moondra Zubir, Ph.D

Editor :
Haqqi Annazili Nasution, S.Pd., M.Pd
Ricky Andi Syahputra, S.Pd., M.Sc
Feri Andi Syuhada, S.Pd., M.Pd
Susilawati Amdayani, S.Si., M.Pd
Siti Rahmah, S.Pd., M.Sc

Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr. V Medan Estate, Medan 20221

Penerbit FMIPA Universitas Negeri Medan

SUSUNAN KEPANITIAN

SEMINAR NASIONAL KIMIA DAN PENDIDIKAN KIMIA#2
Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Medan
11 Desember 2021

PEMBINA
Dekan FMIPA UNIMED : **Prof. Dr. Fauziyah Harahap, M.Si**

PENGARAH
Wakil Dekan 1 FMIPA UNIMED : **Dr. Jamalum Purba, M.Si**
Wakil Dekan 2 FMIPA UNIMED : **Dr. Ani Sutiani, M.Si**
Wakil Dekan 3 FMIPA UNIMED : **Dr. Rahmatsyah, M.Si**

PENANGGUNGJAWAB
Ketua Jurusan KIMIA UNIMED : **Dr. Ayi Darmana, M.Si**

WAKIL PENANGGUNGJAWAB
Sekretaris Jurusan KIMIA UNIMED : **Drs. Jasmidi, M.Si**

KETUA
Dr. Ahmad Nasir Pulungan, S.Si.,M.Sc
SEKRETARIS
Haqqi Annazili Nasution, S.Pd., M.Pd
BENDAHARA
Susilawati Amdayani, S.Si., M.Pd

SEKSI IT, WEB DAN PUBLIKASI
1. **Dr. Zainuddin M, M.Si (Koordinator)**
2. Siti Rahmah, S.Pd., M.Sc
3. Ricky Andi Syahputra, S.Pd., M.Sc

SEKSI ACARA DAN PRESENTASI
1. **Moondra Zubir, M.Si., Ph.D (Koordinator)**
2. Makharany Dalimunthe, S.Pd., M.Pd

SEKSI ABSTRAK, DAN MAKALAH
1. **Dr. Lisnawaty Simatupang, M.Si (Koordinator)**
2. Dr. Herlinawati, M.Si
3. Muhammad Isa Siregar, S.Si., M.Pd

SEKSI ADMINISTRASI DAN KESEKRETARIATAN
1. **Dr. Destria Roza, M.Si (Koordinator)**
2. Nora Susanti, S.Si., M.Sc., A.Pt

SEKSI BIDANG PERLENGKAPAN DAN DOKUMENTASI
1. **Risdo Gultom, S.Pd., M.Pd (Koordinator)**
2. Feri Andi Syuhada, S.Pd., M.Pd

KATA PENGANTAR

Puji syukur kami panjatkan kehadirat Allah SWT Tuhan Yang Maha Esa, karena atas Karunia dan Rahmat-Nya Prosiding Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 yang telah diselenggarakan oleh Jurusan Kimia FMIPA UNIMED pada tanggal 11 Desember 2021 melalui ***Virtual Conference*** dapat diselesaikan. Ucapan terima kasih kami sampaikan kepada seluruh pihak yang telah membantu dalam penyusunan prosiding ini.

Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia adalah seminar tahunan yang diselenggarakan oleh Jurusan Kimia Unimed. Pada Seminar ke dua ini mengambil tema **"Peran Strategis Kimia Dan Pendidikan Kimia Terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan Dan Teknologi Dalam Revolusi 4.0 Di Era New Normal".** Melalui skegiatan seminar ini berbagai hasil penelitian, ide dan pemikiran peneliti di bidang kimia, praktisi kimia dan pendidikan kimia telah dipresentasikan.

Prosiding ini memuat karya tulis terdiri dari berbagai hasil penelitian dalam bidang kimia dan pendidikan kimia. Makalah yang dimuat dalam prosiding ini meliputi makalah dari *keynote dan invited speaker*, makalah dari pemalakah utama dari bidang Kimia meliputi sub bidang Kimia Analitik, Kimia Orgnik dan Anorganik, Kimia Fisik dan Polimer, Biokimia dan Bioteknologi dan makalah utama Pendidikan Kimia.

Semoga penerbitan prosiding ini dapat bermanfaat baik untuk kalangan kimiawan, pengguna ilmu kimia dan pemerhati pendidikan kimia maupun pembaca lainnya dalam pengembangan penelitian dimasa akan datang. Akhir kata kepada semua pihak yang telah membantu, kami ucapkan
terima kasih.

Medan, Juli 2022

Tim Editor

SAMBUTAN KETUA PANITIA

Assalaamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh,

Selamat pagi dan salam sejahtera untuk kita semua.

Pertama-tama marilah kita panjatkan puji syukur ke hadirat Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya, sehingga pada pagi hari ini kita dapat berkumpul untuk mengikuti acara Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 Jurusan kimia FMIPA UNIMED dengan tema "Peran Strategis Kimia dan Pendidikan Kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal". Dengan menghadirkan Dr. Harry Firman, M.Pd (UPI), Prof. Dr. Karna Wijaya, M.Eng (UGM), Dr. Asep Wahyu Nugraha (UNIMED) sebagai *keynote speaker* dan Drs. Zulfan Mazaimi, M.Pd (Ketua PPSKI-Sumut), Dr. Eng. Yulia Eka Putri (Unand) dan Dr. Vivi Purwandari (Universitas Sarimutiara Indonesia) sebagai *invited speaker*.

Seminar Nasional ini diselenggarakan dengan tujuan untuk: 1) Mengkomunikasikan dan memfasilitasi interaksi professional antar komunitas kimia dan pendidikan Kimia di Indonesia untuk saling berbagai informasi dan 2) Meningkatkan kerjasama antara para pendidik, peneliti dan praktisi. Kegiatan Seminar Nasional ini diharapkan dapat menjadi forum pertemuan antara ilmuwan peneliti dalam bidang kimia, praktisi kimia, dan pendidikan kimia, serta *stake holder* lainnya untuk bekerjasama dan sharing terkait peran Strategis kimia dan pendidikan kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal. Untuk mencapai tujuan tersebut, kami panitia telah mengundang Dosen, peneliti, pendidik, mahasiswa dan pemerhati dalam bidang kimia dari berbagai instansi di wilayah tanah air. Undangan tersebut telah ditanggapi oleh registrasi peserta sebanyak 150 orang peserta dari berbagai kalangan dan wilayah Ujung Timur sampai Barat Indonesia dengan 86 peserta akan mempersentasikan makalahnya.

Akhir kata Kami panitia menyampaikan terimakasih kepada *keynote speaker* dan *invited speaker*, peserta dan pemakalah, juga segenap undangan kami atas peran sertanya dalam seminar ini. Panitia telah berusaha untuk mempersiapkan seminar ini dengan sebaik-baiknya, namun kami meminta maaf apabila terdapat kekurangan dalam pelayanan kami Kami. Kiranya kegiatan seminar nasional ini dapat memberikan manfaat bagi kita semua.

Wassalamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh

Medan, 11 Desember 2021
Ketua Panitia ,

Dr. Ahmad Nasir Pulungan, M.Sc
NIP. 198106182012121005

SAMBUTAN KETUA JURUSAN

Assalaamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh,

Selamat pagi dan salam sejahtera untuk kita semua.

Puji syukur ke hadirat Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya, sehingga kita dapat mengikuti acara Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 Jurusan kimia FMIPA UNIMED. Kami mengucapkan selamat datang kepada seluruh peserta seminar dan semoga kegiatan seminar ini dapat memberikan kontribusi bagi pengembangan ilmu Kimia dan Pendidikan Kimia. Kegiatan Seminar ini juga diharapkan dapat menjadiwadah bagi ilmuwan peneliti dalam bidang kimia, praktisi kimia, dan pendidikan kimia, serta *stake holder* lainnya untuk bekerjasama dan sharing terkait peran Strategis kimia dan pendidikan kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal.

Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 tahun 2021 ini bertema" peran Strategis kimia dan pendidikan kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal" Dengan menghadirkan Dr. Harry Firman, M.Pd (UPI), Prof. Dr. Karna Wijaya, M.Eng (UGM), Dr. Asep Wahyu Nugraha (UNIMED) sebagai *keynote speaker* dan Drs. Zulfan Mazaimi, M.Pd (Ketua PPSKI-Sumut), Dr. Eng. Yulia Eka Putri (Unand) dan Dr. Vivi Purwandari (Universitas Sarimutiara Indonesia) sebagai *invited speaker*.Penyelenggraan seminar nasional ini begitu penting bagi kami Jurusan Kimia FMIPA UNIMED dalam rangka meningkatka peran serta mahasiswa dan dosen dalam kegiatan pertemuan ilmiah dan publikasi yang akan menunjang pada akreditasi Jurusan Kimia FMIPA UNIMED.

Saya selaku ketua Jurusan Kimia FMIPA UNIMED mengucapkan terimaksih yang sebesar-besarnya kepada seluruh panitia yang telah bekerja keras untuk terselenggarakannya kegiatan seminar ini. Akhir kata, semoga apa yang menjadi tujuan dan harapan pada kegiatan Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia ini dapat terwujud serta dapat memberikan manfaat bagi kita semua.

Wassalamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh.

Medan, 11 Desember 2021
Ketua Jurusan FMIPA UNIMED

Dr. Ayi Darmana, M.Si
NIP. 196608071990101001

SAMBUTAN DEKAN

Assalamualaikum..W..Wbr…….Salam Sejahtera bagi kita semua,

Puji syukur kehadirat Allah SWT, Tuhan Yang Maha Esa berkat rahmat dan karuniaNya kita dapat mengikuti kegiatan Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 yang diselenggarakan oleh Jurusan Kimia FMIPA UNIMED. Kegiatan Seminar ini menghadirkan *keynote speaker* Dr. Harry Firman, M.Pd (UPI), Prof. Dr. Karna Wijaya, M.Eng (UGM), Dr. Asep Wahyu Nugraha (UNIMED), dan invited speaker Drs. Zulfan Mazaimi, M.Pd (Ketua PPSKI-Sumut), Dr. Eng. Yulia Eka Putri (Unand) dan Dr. Vivi Purwandari (Universitas Sarimutiara Indonesia). Kami mengucapkan selamat datang kepada seluruh peserta seminar dan semoga kegiatan ini memberikan kontribusi positif bagi pengembangan Ilmu Kimia dan Pendidikan kimia.

Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia Jurusan Kimia FMIPA UNIMED telah ditetap sebagai kegiatan rutin yang diselenggarakan setiap tahunnya. Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan kimia#2 tahun 2021 ini mengangkat tema " Peran Strategis Kimia dan Pendidikan Kimia terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal". Meski kita saat ini masih belum keluar dari masa pandemik CoVID-19, namun perkembangan teknologi yang begitu pesat di era industi 4.0 telah melahirkan peluang dan tantangan baru. Karenanya penelitian dalam bidang Kimia dan teknik pembelajarannya harus dapat berkontribusi pada peningkatan dan pengembangan ketrampilan digital (ICT) dalam proses pembelajaran, dan juga mampu mengintegrasikan teknolgi tersebut dalam kegiatan penelitian dilaboratorium kimia. Peningkatan dan pengembangan tersebut tentu saja baik ditinjau dari sisi materi, teknologi pembelajaran, kegiatan penelitian, dan pembentukan karakter. Melalui kegiatan Seminar Nasional ini, Kami berharap bapak/ibu dapat bertukar pikiran untuk dapat mensinergikan hasil-hasil penelitian dikampus dengan kebutuhan masyarakat dan kolaborasi dengan stakeholder dan industri dalam rangka menterjemahkan tema diatas.

Akhir kata, Kami mengucapkan terimakasih kepada seluruh panitia yang telah bekerja keras untuk terselenggranya kegiatan seminar ini.

Medan, 11 Desember 2021
Dekan FMIPA UNIMED

Prof. Dr. Fauziyah Harahap, M.Si
NIP. 196607281199103200 2

DAFTAR ISI

SUSUNAN KEPANITIAAN iii
KATA PENGANTAR iv
SAMBUTAN KETUA PANITIA v
SAMBUTAN KETUA JURUSAN vi
SAMBUTAN DEKAN vii
DAFTAR ISI viii

Keynote & Invited Speaker

Pendidikan Kimia 4.0
Harry Firman ……..……..1-7

Riset Inovasi Nanomaterial Untuk Pembangunan Berkelanjutan
Karna Wijaya ……...…….8-10

Penentuan Karakteristik Transisi Spin Pada Kompleks [$Fe_4(Htrz)_{10}(Trz)_5]Cl_3$ Menggunakan Perhitungan Kimia Komputasi Dengan Berbagai Fungsi/ Basis Set
Asep Wahyu Nugraha, Ani Sutiani, Muhamad A Martoprawiro dan Djulia Onggo…….…….11-17

$SrTiO_3$ Nanokubus: Material Penghasil Energi Listrik Alternatif (Termoelktrik)
Yulia Eka Putri, dkk……18-18

Karakteristik Grafena dari Limbah Padat Kelapa Sawit
Vivi Purwandari ……..……19-23

Implementasi Pembelajaran Stem Berbasis Lingkungan Dalam Meningkatkan Penguasaan Konsep Sistem Koloid,Aktivitas Dan Kreativitas Peserta Didik SMAN. 2 Rantau Utara
Zulfan Mazaimi, Irma Sary, Fitriana Ritonga ……..……..24-31

Makalah Kimia

Studi Awal Konversi Limbah Pelepah Kelapa Sawit Menjadi Bio-Oil Dengan Teknik Semi Fast Pyrolysis sebagai Sumber Bahan bakar Alternatif
Muhammad Irvan Hasibuan, dkk..…….32-38

Review Artikel: Studi Potensi Biomassa Menjadi Bio-Oil Menggunakan metode Pirolisis sebagai sumber Energi Baru Terbaharukan
Hana Ria Wong, Muhammad Irvan Hasibuan, Agus Kembaren, Ahmad Nasir pulungan, Junifa Layla Sihombing.....……..39-46

Pengaruh Penambahan Cellulose Nanocrystal (CNC) Dari Kulit Durian Durio Zibethinus Murr Terhadap Karekteristik Bionanocomposite Edible Film Berbasis Gelatin
Yahya Indahsya, I Gusti Made Sanjaya……....47-57

Grafting Nanokomposit Karbon Nanotube Kitosan
Masdania Zurairah Siregar, Vivi Purwandari, Rahmad Rezeki……58-62

Permodelan Molekul Senyawa Turunan 2-Aminokalkon Dengan Substitusi Pada Cincin B Sebagai Agen Antikanker
Sya sya Azzaythounah, Tico Guinessha Samosir, Destria Roza……..63-70

Analisa Termal Bioplastik Dengan Bahan Pengisi Ekstrak Rambut Jagung
A Zukhruf Akbari, M Zaim Akbari, Gimelliya Saraih , Vivi Purwandari……71-74

HKSA Antikanker Turunan 4-Aminochalcon Terhadap HeLa Dengan Metode Semiempiris CNDO Dan Regresi Linear
Alfrindah Priscilla Br. Simanjuntak dan Destria Roza……..75-81

Kajian Senyawa Kb Sebagai Kanker Nasofaring Epidermoid Menggunakan Metode CNDO (Hyperchem) Dan Regresi Linear (SPSS)
Hidayani dan Destria Roza ……82-88

Pemurnian Sulfur Dengan Proses Sublimasi
Hammid Al Farras , Felix Valentino Sianturi ……..……..…….…...89-92

Penentuan Kandungan Antioksidan Total dari Infusa Bayam Hijau (Amaranthus Hybridus L.) Hidroponik dan Konvensionaldengan Metode MPM
Yefrida, Widuri Rosman dan Refilda ……93-98

Docking Molekular Potensi Anti Inflamasi Protein 1oq5 dengan Senyawa Turunan Kurkumin
Nurul Hidayah, Ruth Yohana Saragih, Destria Roza ...……..…….……..99-103

Pengaruh Ekstrak Etanol Daun Sarang Banua (Clerodendrum fragran Vent Willd)Terhadap Kadar Trigliserida Serum Tikus Yang Diberi Pakan Tinggi Lemak
Yohana Stefani Manurung dan Murniaty Simorangkir …….104-109

Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Senyawa Turunan4-Aminochalcone terhadap Human T-Leukimia (CEM)
Hasri Tri Maya Saragih, dan Destria Roza…….110-114

ReNyirih: INOVASI EKSTRAK KINANG BERBASIS SOCIOPRENEUR
Sri Adelila Sari, Elva Damayanti Lubis, Syafira Fatihah Rizqi, Yulia Ayu Utami Tarigan, DwiAntika Br, Nasution, Eny Setiadi Saragih ...……..…….115-119

Review Artikel: Krakterisasi dan Aktivitas Lisozim serta Aplikasinya sebagaiAntibakteri
Agustin Dwi Ayuningsih dan Mirwa Adiprahara Anggarani ……120-125

HKSA Senyawa Turunan Metoksi-Aminokalkon Terhadap Murine Leukemia (L1210)Menggunakan Metode Semiempiris CNDO Dan Regresi Linear
Elfrida Siregar dan Destria Roza ...……..…….126-132

Hubungan Kuantitatif Stuktur-Aktivitas Senyawa Turunan Aminokalkon Pada Sel Murine MammaryCarcinoma (FM3A) Menggunakan Metode CNDO (Hyperchem) Dan Regresi Linear (SPSS)
Suria Bersinar Siahaan1 Destria Roza ...……..……..133-139

Analysis Of Crude Protein (PK) , Carbohydrate And Moisture Content (KA) Levels In Fresh Leaves Of Guatemala Grass (Tripsacumlaxum) In The Low Plants, Secanggang District Langkat District
Nur Asyiah Dalimunthe dan Muhammad Usman ……..140-143

Uji Efektivitas Antibakteri Nanogel Bahan Aktif Ekstrak Kayu Manis(Cinnamomum Burmannii) Terhadap Staphylococcus aureus
Hestina, Erdiana Gultom, Vivi Purwandari ...……..……..143-149

Makalah Pendidikan Kimia

Analisis Media Pembelajaran di SMA Swasta Kwala Begumit Kelas XI Kota Binjai Pada Masa Pandemi Covid19
Elsa FebrinaTarigan, Nurfajriani, Zainuddin Muchtar……...150-154

Pengembangan Lembar Kerja Siswa (LKS) Elektronik Berbasis Android Dengan Pendekatan Contextual Teaching And Learning(CTL) Pada Materi Termokimia
Azizah Hawanif dan Feri Andi Syuhada ...……..……..……155-164

Pengembangan Lembar Kerja Siswa (LKS) Dengan Menggunakan Pendekatan Kontekstual Berbasis Multiple Representasi Pada Materi Laju Reaksi
Nurul Huda dan Feri Andi Syuhada ...165-172

Pengembangan Instrument Asessment Higher Order Thinking Skill (HOTS) Untuk Mengukur Kemampuan Berpikir Tingkat Tinggi Pada Materi Hidrolisis Garam
Alfi Rizkina Lubis, Ajat Sudrajat, Asep Wahyu Nugraha ...173-181

Analisis Model Rasch: Identifikasi Instrumen Tes Representasi Kimia Topik Materi Berdasarkan Kurikulum Cambridge
Mufti Muhammad Hamzah, E Eliyawati, Rika Rafikah Agustin ...182-188

Pengaruh Media Physics Education Technology (PhET) Terhadap Aktivitas Dan Hasil Belajar Siswa Pada Materi Bentuk Molekul
Suci Setia Crise Manullang, Lisnawaty Simatupang ...189-195

Pengaruh Macromedia Flash Berbasis Model Problem Based Learning Terhadap Motivasidan Hasil Belajar Siswa SMA pada Materi Laju Reaksi Inki
Yun Lamtiur dan Lisnawaty Simatupang ...196-200

Pengaruh Penggunaan Media Pembelajaran Kimia Interaktif iSpring Presenterterhadap Hasil Belajar dan Motivasi Siswa pada Materi Laju Reaksi
Yoshe Vego Passarella Simarmata dan Ida Duma Riris ...201-211

Validasi dan Respon Media Video Animasi (PowToon) Berbasis ReligiusPada Pembelajaran Ikatan Kimia
Ade Kurnia Putri Tanjung dan Ayi Darmana ...212-218

Pengembangan Model Pembelajaran Inovatif Berbasis Proyek Berorientasi Kkni Untuk Meningkatkan Kompetensi Mahasiswa
Bajoka Nainggolan, Manihar Situmorang, Ramlan Silaban ...219-229

Pengembangan Sumber Belajar Inovatif Berbasis Proyek Untuk Materi Isolasi Senyawa Organik Bahan Alam Dalam Menghadapi Era New Normal
Dessy Novianty Pakpahan, Marham Sitorus, dan Saronom Silaban ...230-235

Implementasi Asesmen Kompetensi Minimum Materi Asam Basa Konteks Saintifik
Izza Nabilatunnisa, Wiwi Siswaningsih, Nahadi ...236-244

Pengaruh Model Pembelajaran Problem Based Learning Menggunakan Macromedia Flash Terhadap Aktivitas Dan Hasil Belajar Ikatan Kimia
Siswa Cessya Noviandra Br Tarigan dan GulmahSugiharti ...245-251

Validitas Tes Diagnostik untuk Materi Pembelajaran Ikatan Kimia SMA
Winda Fourthelina Sianturi dan Zainuddin Muchtar ...252-256

Pengembangan Lembar Kerja Peserta Didik (LKPD) Berbasis Discovery Learning Pada Materi Asam Basa
Eratania Surbakti , Makharany Dalimunthe ...257-267

Analisis Kebutuhan Bahan Ajar Kimia Koloid Berbasis Online untuk Siswa SMA
Elssya Dwi Imanuella Manullang, Ramlan Silaban ...268-273

Pengaruh Penggunaan Media Webblog Terhadap Motivasi Dan Hasil BelajarSiswa Sma Pada Materi Ikatan Kimia
Febiola Rohani Marpaung dan Murniaty Simorangkir ...274-279
Validitas dan Reliabilitas Instrumen Penelitian Tes dan Non Tes PadaMateri Laju Reaksi
Freshya Sionitha Sembiring dan Haqqi Annazili Nasution ...280-284

Analisis Kebutuhan Media Pembelajaran Kimia Berbasis Komputer Untuk Mengajarkan Laju Reaksi Pada Siswa SMA

Julianse Lydia Nababan dan Ramlan Silaban ...……..……..…….……..285-290

Pengembangan Media Pembelajaran Berbasis Android pada Materi Ikatan Kimia
Sabrina Khairani Hasibuan dan Destria Roza ……..……...……291-297

Pengembangan Bahan Ajar Kontekstual Berbasis Evaluasi HOTS Untuk Meningkatkan Hasil Belajar dan Nilai Karakter Siswa Pada Materi Asam Basa di SMA N 4 Pematang Siantar
Frida Claudia Sianipar dan Marham Sitorus ...……..…….298-308

Pengembangan E-Modul Pembelajaran Pada Pembuatanbriket Limbah Kulit Durian Dan Sabut Kelapa Pada Materi Senyawa Hidrokarbon Kelas XI
Dessy Agustina, Julia Maulina, Hasrita Lubis ...……..…….……..309-315

Pengembangan Bahan Ajar Berbasis Problem Based Learning (PBL) Pada Materi Ikatan Ion Dan Kovalen Untuk Kelas X
Ayu Inggrias Tuty dan Jamalum Purba ...……..…….316-322

Pengembangan Bahan Ajar Berbasis Project Based Learning (PjBL) Pada Materi Ikatan Ion Dan Kovalen Untuk Kelas X
Else R Sigalingging dan Jamalum Purba ...……...……..……..……..323-327

Pengembangan Media Pembelajaran Terintegrasi Scrabble Berbasis Android Pada Materi Senyawa Hidrokarbon Kelas XI
Elmirawanti Sihite dan Nora Susanti ...……..……..…….……..328-334

Implementasi Animasi Flash Terhadap Aktivitasdan Hasil Belajar Siswa Pada Materi Ikatan Kimia
Elsima Nainggolan dan Nora Susanti ...……..……...…….335-341

Analisis Respon Siswa Terhadap Aplikasi Daringsebagai Sumber Dan Media Belajar Alternatif Pada Mata Pelajaran Kimia Selama Pandemi
Jumasari Siregar dan Nurfajrian ...……..……...…….342-345

Pengembangan Media Pembelajaran Berbasis Android dengan menggunakan Software Construct 2 pada Materi Laju Reaksi
Natalin Pertiwi Siahaan dan Nora Susanti ...……..……,,,……..346-350

Makalah Poster

Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (Hksa) Dan Docking Molekuler Senyawaturunan 2-Aminokalkon Sebagai Obat Antikanker Tulang
Tico Guinessha S, Rissah Maulina, SyaSya Azzaythounah, Lidia Mutia Sari, DestriaRoza ...……..…..351-356

Doking Molekular Potensi Antikanker Leukemia Protein P388 Dengan Senyawa Turunan Chalcone
Nadia Givani Br Hotang dan Destria Roza ...……..357-361

Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4- Aminochalcone sebagai Antikanker Radikal Hidroksil
Indah Fitri dan Destria Roza ...……..……..362-368

Studi Molecular Docking Senyawa Antosianidin Dari Ekstrak Buah Jamblang (Syzygium cumini) Sebagai Senyawa Anti-Tumor Secara In Silico
Dea Gracella Siagian dan Destria Roza ...……..……...……..369-374

Docking Molekular Potensi Antikanker Payudara Protein3ert Dengan Senyawa Turunan Kuinin
Ruth Yohana Saragih, Nurul Hidayah, Destria Roza ……...……..375-381

Studi In Silico Potensi Senyawa Asam Askorbat Sebagai Anti Kanker Hati
Nia Veronika dan Destria Roza ……..……..…….382-386

Analisis In-Silico Senyawa Aktif Flavonoid Tanaman Kelor Sebagai Inhibitor Main Protease SARS-CoV-2 Melalui Metode Molecular Docking
Saud Salomo dan Destria Roza ……..……..…….387-395

Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4- Aminochalcone SebagaiAnti Leukemia Murine (L1210)
Wirna Dewi Zebua dan Destria Roza ……..……..……396-403

*Docking Senyawa Kalkon Terhadap Reseptor Esterogen-*Q *(1QKM) SebagaiAntikanker Payudara*
Cindy Agnesia dan Destria Roza ……..…….....…….404-407

Uji Docking Senyawa Alkaloid Quinolizidine dan Analognya Sebagai InhibitorReseptor Estrogen pada Kanker Payudara
Indira Aviza, Anggita Leontin Sitorus, Destria Roza ……..…….408-415

Uji Docking Senyawa Alkaloid Piperidine dan Analognya SebagaiInhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara
Anggita Leontin Sitorus, Indira Aviza, Destria Roza ……..…….416-423

Studi Docking Molekuler Senyawa Turunan Kurkuminoid Pada Kunyit (Curcuma longa Linn.) Sebagai Inhibitor Protein Kinase Mek1 Sel Kanker Otak Dengan Autodock
Vina Nadia Agnes Cantika Nadeak dan Destria Roza ……..……...……424-430

Docking Ligan Anti Kanker Prostat dengan Ligan Pembanding Senyawa TurunanAsam Galat Menggunakan Autodock 4.2 dan Discovery Studio
Astri Devi Br Pakpahan dan Destria Roza ……..……..……431-439

Docking Molekular Potensi Senyawa 2,6-Dimethylocta-3,5,7-Trien-2-Ol Terhadap Senyawa 4ll0 Anti Kanker Paru
Yohansen Wahyudi dan Destria Roza ……..…….……440-444

Docking Molekular Potensi Antikanker Payudara Protein 1yc4 Dari Senyawa Turunan Kuersetin
Depi Irnasari Sipahutar dan Destria Roza ……..……..……445-449

Penentuan karakteristik Transisi Spin pada kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ Menggunakan Perhitungan Kimia Komputasi dengan Berbagai Fungsi/ Basis Set

Asep Wahyu Nugraha[1*], Ani Sutiani[1], Muhamad A Martoprawiro[2] dan Djulia Onggo[2]

[1]Jurusan Kimia, FMIPA, Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr. V, Medan

[1]Jurusan Kimia, FMIPA, Institut Teknologi Bandung
Ganeca 10 Bandung

***Email korespondensi:** aw.nugraha@unimed.ac.id

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan karakteristik TS pada kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ menggunakan perhitungan kimia komputasi dengan berbagai fungsi/basis set. Kompleks Fe(II) 1,2,4 H-triazol klorida merupakan salah satu senyawa kompleks dengan struktur polimerik. Perhitungan kimia komputasi menggunakan model empat ion Fe(II) dengan rumus molekul $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$. Fungsi dan basis set yang digunakan dalam penelitian ini adalah UHF/6-31G(d), B3LYP/6-31G(d), dan TPSSh/TZVP. Hasil perhitungan kimia komputasi memberikan data-data struktur yaitu jarak antar ion Fe(II) dan panjang ikatan Fe-N pada LS dan HS dan perubahan entalpi, entropi, dan energy bebas Gibbs. Data hasil perhitungan dengan UHF/6-31G(d) untuk jarak antar ion Fe(II) pada LS 3,819Å–3,825Å, sedangkan pada HS 3,995Å–4,044Å, panjang ikatan Fe-N pada LS 2,093Å–2,230Å, sedangkan pada HS 2,148Å–2,444Å, ΔH=-1164,916kJ/mol, ΔS=0,201kJ/mol.K, dan ΔG=-1224,851kJ/mol. Data hasil perhitungan dengan B3LYP/6-31G(d) untuk jarak antar ion Fe(II) pada LS 3,661Å-3,680Å, sedangkan pada HS 3,911Å–3,946Å, panjang ikatan Fe-N pada LS 1,960Å–2,089Å, sedangkan pada HS 2,092Å–2,367Å, ΔH=-51,426 kJ/mol, ΔS=0,279kJ/mol.K, dan ΔG=-134,578kJ/mol. Data hasil perhitungan dengan TPSSh/TZVP untuk jarak antar ion Fe(II) pada LS 3,644Å–3,666Å sedangkan pada HS 3,883Å–3,914Å panjang ikatan Fe-N pada LS 1,950Å–2,033Å, sedangkan pada HS 2,100Å–2,481Å, ΔH=83,449kJ/mol, ΔS= 0,288kJ/mol.K, dan ΔG=-2,334 kJ/mol.

Kata kunci : $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$, perhitungan komputasi, UHF/6-31G(d), B3LYP/6-31G(d), dan TPSSh/TZVP

Abstract

This study aims to determine the TS characteristics of the $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ complex using computational chemistry calculations with various functions/basis sets. The Fe(II) 1,2,4 H-triazole chloride complex is a complex compound with a polymeric structure. The computational chemistry calculations using a model of four Fe(II) ions with the molecular formula $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$. The study used functions/ basis sets are UHF/6-31G(d), B3LYP/6-31G(d), and TPSSh/TZVP. The results of computational chemistry calculations provide structural data, namely the distance between Fe(II) ions and the length bond of the Fe-N in LS and HS and changes in enthalpy, entropy, and Gibbs free energy. The data calculated using UHF/6-31G(d) for the distance between Fe(II) ions LS 3.819Å–3.825Å, while in HS 3.995Å–4.044Å, the bond length of Fe-N in LS is 2.093Å – 2.230Å, while in HS 2.148Å–2.444Å, ΔH=-1164.916kJ/mol, ΔS=0.201kJ/mol.K, and ΔG=-1224.851kJ/mol. The data calculated using B3LYP/6-31G(d) for the distance between Fe(II) ions in the LS 3.661Å-3.680Å, while in the HS 3.911Å–3.946Å, the bond length of the Fe-N in the LS is 1.960Å–2.089Å, while at HS 2.092Å–2.367Å, ΔH=-51.426 kJ/mol, ΔS=0.279kJ/mol.K, and ΔG=-134.578kJ/mol. The data calculated using TPSSh/TZVP for the distance between Fe(II) ions in LS 3.644Å–3.666Å while in HS 3.883Å–3.914Å the bond length of Fe-N in LS 1.950Å–2.033Å, while in HS 2.100Å–2.481Å , ΔH=83.449kJ/mol, ΔS= 0.288kJ/mol.K, and ΔG=-2.334 kJ/mol.

Keywords: $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$, computational calculation, UHF/6-31G(d), B3LYP/6-31G(d), and TPSSh/TZVP

1. Pendahuluan

Kompleks Fe(II) 1,2,4 H-triazol klorida merupakan salah satu senyawa kompleks yang memiliki karakteristik transisi spin (TS). Peristiwa transisi spin merupakan peristiwa perubahan dari keadaan spin rendah

ke keadaan spin tinggi atau sebaliknya akibat pengaruh suhu, tekanan, dan radiasi cahaya [1] dan [2]. Peristiwa transisi spin terjadi karena sifat ligan yang digunakan memiliki kekuatan medan ligan menengah. Sifat transisi spin (TS) atau spin crossover merupakan suatu sifat yang ditemukan pada beberapa senyawa kompleks. Peristiwa transisi spin merupakan perpindahan elektron antara orbital t2g dan eg dalam senyawa kompleks oktahedral. Senyawa-senyawa yang memiliki sifat TS dapat digunakan untuk berbagai keperluan di antaranya sebagai saklar atau sensor akibat pengaruh cahaya, temperatur, tekanan, dan perlakuan fisik lainnya. Senyawa-senyawa kompleks yang memiliki karakteristik TS dapat digunakan untuk berbagai keperluan di antaranya sebagai saklar atau sensor akibat pengaruh cahaya, temperatur, tekanan, dan perlakuan fisik lainnya [3]. Selain digunakan sebagai material sensor, senyawa kompleks dengan karakteristik TS dapat digunakan sebagai material penyimpan data [4], [5], dan [6]. Ligan 1, 2, 4, triazol (Htrz) merupakan suatu ligan yang dapat membentuk senyawa kompleks dengan ion logam Besi (II) yang memiliki karakteristik transisi spin. Pada keadaan spin rendah kompleks ini umumnya berwarna lilac (ungu) dan bersifat diamagnetik. Ketika suhu dinaikkan, kompleks ini tidak berwarna dan bersifat paramagnetik. Perubahan ini terjadi secara reversibel di sekitar suhu ruang dan dipengaruhi juga oleh jenis anion dan jumlah air kristal.

Secara eksperimen kajian terhadap kompleks yang terbentuk dari Besi (II) dengan ligan H-triazol telah diteliti oleh beberapa peneliti. Sugiyarto, dkk [7] telah berhasil melakukan kajian terhadap kompleks Fe(trzH)2(trz)X, dengan X= BF4-, ClO4-, dan PF6- dengan cara pengukuran kemagnetan dan spektra Mössbauer. Hasil yang diperoleh menunjukkan senyawa kompleks Fe(II) triazol dengan anion BF4- dan ClO4- memiliki suhu transisi di atas suhu ruang sedangkan untuk anion PF6- terjadi di bawah suhu kamar. Lavrenova, dkk [8] telah membuat kompleks besi (II) dengan Htrz dan anion klorida. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa adanya air kristal pada kompleks [Fe(Htrz)3]Cl2 akan menggeser suhu transisi ke suhu yang lebih rendah. Faulmann, dkk [9] telah berhasil mendapatkan kompleks [Fe(Htrz)2(trz)](BF4) yang berukuran nano menggunakan matriks silika dan melaporkan suhu transisinya di atas 100°C.

Kajian kimia komputasi terhadap karakteristik TS pada kompleks besi(II) yang memiliki inti tunggal telah dilakukan dengan menggunakan metode DFT. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa kompleks [Fe(pldpt)3](BF4)2.1½H2O memiliki karakteristik TS [10]. Kajian kimia komputasi terhadap kompleks Fe(II) berinti tiga menunjukkan bahwa kompleks yang terbentuk memiliki sifat TS pada ion Fe(II) dengan kerangka FeN6 sedangkan pada bagian terminal yang memiliki kerangka FeN3O3 tidak memperlihatkan sifat TS [11]. Kajian kimia komputasi pada senyawa kompleks TS berinti tunggal trans-[Fe(stirilpiridin)4(NCX)2] (X = S, Se, dan BH3) telah mendapatkan suhu TS, tetapi hasil yang diperoleh menunjukkan selisih yang besar yaitu sekitar 50K dibandingkan dengan hasil pengukuran secara eksperimen [12]. Kajian komputasi untuk memprediksi struktur dan stabilitas ion kompleks Fe(II)-Htrz telah dilakukan menggunakan metode HF, B3LYP, dan TPSSh dengan basis set 3-21G, 6-31G(d), dan TZVP. Hasil penelitian menunjukkan bahwa struktur kompleks Fe(II)-Htrz mirip dengan kompleks Cu(II)-Htrz dan kompleks dengan salah satu ligan terdeprotonasi lebih stabil dibandingkan dengan kompleks dengan ligan yang tidak terdeprotonasi [13]. Pada kajian karakteristik TS secara komputasi sebelumnya telah ditentukan suhu TS untuk kompleks dengan inti tunggal, tetapi penentuan suhu TS dan pola TS belum dilaporkan untuk kompleks dengan struktur polimer. Metode kimia komputasi merupakan metode yang dapat digunakan untuk menentukan suhu TS dan dapat memprediksi pola TS kompleks dengan struktur polimer. Studi lain dari parameter struktural kompleks Fe (II) -Htrz menunjukkan data bahwa jarak antara ion Fe (II) dan panjang ikatan Fe-N sesuai dengan nilai eksperimental. Perhitungan kimia komputasi memprediksi rumus molekul kompleks polimer Fe (II) -Htrz adalah $([Fe(Htrz)_2trz]^+)_n$ [14]. Kajian komputasi terhadap struktur kompleks Cu(II) 1,2,4 H-triazol telah dilakukan. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa struktur kompleks Cu(II) 1,2,4 H-triazol mirip dengan struktur kompleks Fe(II) 1,2,4 H-triazol [15]. Kajian termodinamika pada kompleks Fe(II) 1,2,4 H-triazol klorida telah dilakukan menggunakan metode Density Functional Theory. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa data-data struktur hasil perhitungan kimia komputasi mirip dengan data-data hasil pengukuran di laboratorium [16].

Studi tentang struktur geometris, energi relatif, pergeseran kimia, dan orbital HOMO untuk struktur dichloro- (1,2-bis (dimethylamino) ethane-N, N ') - timah (II) telah ditentukan melalui kimia komputasi menggunakan Fungsi hybrid PBE dan basis set def2-TZVPP [17]. Dalam perhitungan komputasi digunakan teori Hartree-Fock (HF) dengan metode UHF dan Density Functional Theory (DFT) dengan metode B3LYP dan TPSSh. Ada beberapa kelebihan dan kekurangan DFT dibandingkan dengan pendekatan teori HF. Dalam teori Hartree Fock, fungsi gelombang multi elektron diekspresikan dengan determinan Slater yang dibangun dari satu set N fungsi gelombang elektron tunggal. Seperti pada teori Hartree Fock pada DFT juga menggunakan fungsi gelombang tunggal. Akan tetapi pada teori Hartree Fock menghitung seluruh N fungsi gelombang elektron sedangkan DFT hanya menghitung secara global energi elektron total dan distribusi kerapatan elektron. Pada dasarnya ide pokok dari DFT adalah menghitung secara global energi elektron total dan distribusi kerapatan elektron. Teorema Hohenberg-Kohn memperlihatkan bahwa model Thomas-Fermi dipakai sebagai hampiran dari teori kerapatan fungsional (DFT). Dalam DFT fungsi Energi total elektronik dapat dituliskan sebagai fungsi kerapatan elektron dikemukakan pada Persamaan 1.

$E(\rho) = EEk(\rho)+Ec(\rho)+EH(\rho)+Exc(\rho)$ …….…… (1).

Zein, dkk [18] melakukan kajian teoritis menggunakan simulasi komputer terhadap senyawa kompleks [FeII(DPPA)(NCS)2] dimana (DPPA) (3-aminopropyl)bis(2-pyridylmethyl)amine]. Kajian teoritis melalui simulasi komputer terhadap pengaruh basis set pada keadaan energy spin transisi pada senyawa kompleks 1 Fe-(PyPepS)2 (PyPepSH2) N-(2-mercaptophenyl)- 2-pyridinecarboxamide), 2 Fe(tsalen)Cl (tsalen) N,N′-ethylenebis-(thiosalicylideneiminato)), 3 Fe(N(CH2-o-C6H4S)3)(1-Me-imidazole), and 4 FeFHOH telah dikaji oleh Güell [19]. Kuiken dkk [20] telah dilakukan kajian teoritis menggunakan metode ab initio pada pengaruh induksi cahaya terhadap struktur electron pada senyawa kompleks $[Fe(tren(py)_3)]^{2+}$ dan $[Fe(tren(6\text{-}Me\text{-}py)_3)]^{2+}$. Furukawa [21] telah melakukan kajian teoritis terhadap senyawa kompleks yang terbentuk antara Besi (II) dengan ligan tipe TPA dengan jumlah 4-nitropyridine yang berbeda yaitu [(PyCH2)3-n (4-NO2PyCH2)nN] (n = 0-3) (1-4).

2. Metode Penelitian

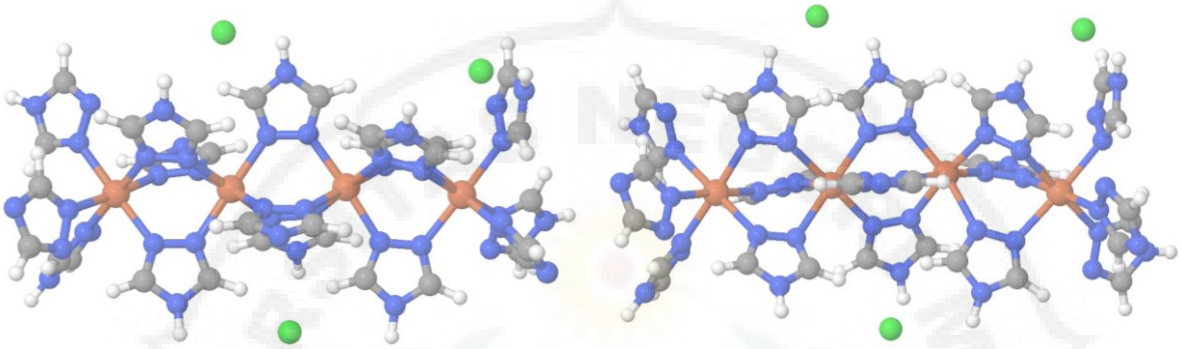
Perhitungan kimia komputasi merupakan salah satu metode penentuan sifat-sifat kimia suatu senyawa kimia yang saat banyak digunakan dalam beberapa penelitian kimia. Secara garis besar perhitungan kimia komputasi menggunakan teori mekanika molekul dan mekanika kuantum. Pemakaian kedua metode tersebut sangat tergantung kepada tujuan dan data-data yang diperlukan dalam penentuan sifat-sifat senyawa kimia. Perhitungan kimia komputasi dalam penelitian ini menggunakan teori mekanika kuantum untuk menentukan sifat-sifat senyawa kimia. Senyawa kimia yang dipelajari dalam penelitian ini adalah Besi(II) 1,2,4 H-triazol klorida. Sampai saat ini, struktur senyawa kompleks Besi(II) 1,2,4 H-triazol klorida belum berhasil ditumbuhkan. Berdasarkan kajian-kajian sebelumnya terkait struktur diperoleh bahwa struktur senyawa kompleks tersebut adalah polimerik [22]. Senyawa kompleks Besi(II) 1,2,4 H-triazol klorida memiliki struktur polimer, dalam perhitungan kimia komputasi ini menggunakan kerangka struktur $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]^{3+}$ [14] dan ditambahkan dengan anion Cl^-. Perhitungan kimia komputasi yang dilakukan dalam penelitian ini adalah untuk mengoptimasi struktur kompleks dan menentukan variabel-variabel termodinamika. Perangkat lunak yang digunakan dalam perhitungan kimia komputasi pada penelitian ini adalah Gaussian 09 Revision D.01 [23]. Perhingan kimia komputasi dalam penelitian ini menggunakan fungsi/ basis set UHF/ 6-31G(d); set B3LYP/6-31G(d) dan TPSSh/ TZVP. Visualisasi terhadap hasil perhitungan kimia komputasi menggunakan perangkat lunak Jmol [24] dan Avogadro [25]. Tahapan dalam penelitian ini adalah penentuan struktur kompleks, penyusunan z-matriks, menambahkan beberapa data seperti: fungsi/ basis set, muatan, multipilisitas, dan perintah lainnya, melakukan perhitungan kimia komputasi sampai diperoleh data hasil perhitungan komputasi, mengambil beberapa data termodinamika dari data hasil perhitungan kimia komputasi, dan melakukan visualisasi terhadap data hasil perhitungan kimia komputasi. Berdasarkan struktur hasil visualisasi dapat ditentukan data-data struktur kompleks seperti jarak antar ion Fe(II) dan panjang ikatan Fe-N. Perhitungan kimia komputasi dilakukan pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi. Perbedaan input data pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi adalah besarnya multiplisitas. Data-data hasil perhitungan kimia komputasi dapat digunakan untuk menentukan data-data termodinamika [26].

3. Hasil dan Pembahasan

Hasil perhitungan kimia komputasi dapat divisualisasikan menjadi struktur senyawa yang dihasilkan dari aktivitas optimasi geometri. Hasil perhitungan komputasi senyawa kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5](Cl)_3$ pada keadaan spin rendah dan pada keadaan spin tinggi dapat divisualisasikan menggunakan perangkat lunak Jmol. Setelah dibandingkan hasil perhitungan pada fungsi/ basis set UHF/ 6-31G(d); set B3LYP/6-31G(d) dan TPSSh/ TZVP secara visual, struktur yang dihasilkan tidak menunjukkan perbedaan yang signifikan. Oleh karena itu, pada bagian ini hanya dikemukakan visualisasi struktur kompleks dari hasil perhitungan menggunakan fungsi/ basis set B3LYP/6-31G(d). Struktur hasil visualisasi senyawa kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5](Cl)_3$ pada keadaan spin rendah tidak berbeda secara signifikan dengan struktur kompleks pada keadaan spin tinggi. Struktur kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5](Cl)_3$ pada: (a) keadaan spin rendah (b) keadaan spin tinggi hasil perhitungan dengan fungsi/ basis set B3LYP/6-31G(d) dikemukakan pada Gambar 1.

Pada bagian sebelumnya telah dikemukakan bahwa struktur hasil visualisasi untuk kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ hasil perhitungan menggunakan berbagai fungsi/ basis set dan variasi keadaan spin pada ion Fe(II) tidak menunjukkan perbedaan yang signifikan. Data tersebut berbeda dengan data struktur yaitu data jarak antar ion Fe(II) dan panjang ikatan Fe-N yang menunjukkan perbedaan yang signifikan. Berdasarkan hasil pengukuran terhadap struktur hasil visualisasi yang menunjukkan bahwa jarak antar ion Fe(II) dari keadaan spin rendah lebih kecil dibandingkan dengan jarak antar ion Fe(II) dari keadaan spin tinggi. Fenomena ini terjadi pada pada hasil perhitungan pada fungsi/basis set UHF/ 6-31G(d); set B3LYP/6-31G(d) dan TPSSh/TZVP. Hal ini menunjukkan bahwa perubahan keadaan spin ion Fe(II) dari keadaan spin rendah ke keadaan spin tinggi meningkatkan jarak antar ion Fe(II) pada senyawa kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$. Bila data-data hasil perhitungan kimia komputasi dibandingkan dengan data-data jarak antar ion Fe(II) hasil pengukuran di laboratorium menunjukkan selisih yang tidak signifikan. Fenomena ini berlaku untuk ketiga fungsi/ basis set,

dengan demikian akurasi optimasi geometri pada ketiga tidak terlalu berbeda. Beberapa peneliti telah melakukan penentuan jarak antar ion Fe(II) secara eksperimen menunjukkan bahwa jarak antara ion Fe(II) pada keadaan spin rendah sebesar 3,65Å dan 3,87Å pada keadaan spin tinggi [27], sedangkan kajian lainnya diperoleh data jarak antar ion Fe(II) pada keadaan spin rendah 3,63Å dan pada keadaan spin tinggi 3,8Å ([28]. Data jarak antar ion Fe(II) untuk kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ hasil perhitungan kimia komputasi pada beberapa fungsi/ basis set dikemukakan pada Tabel 1.



(a) (b)

Gambar 1. Struktur kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5](Cl)_3$ pada: (a) keadaan spin rendah (b) keadaan spin tinggi hasil perhitungan dengan fungsi/ basis set B3LYP/6-31G(d).

Tabel 1 Jarak antar ion Fe(II) hasil visualisasi data perhitungan kimia komputasi dengan beberapa fungsi/ basis set pada kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi

Fungsi/ basis set	Jarak antar ion Fe(II) dalam Å	
	Keadaan Spin Rendah	Keadaan Spin Tinggi
UHF/6-31G(d)	3,819 – 3,825	3,995 – 4,044
B3LYP/6-31G(d)	3,661 – 3,680	3,911 – 3,946
TPSSh/ TZVP	3,644 – 3,666	3,883 – 3,914

Panjang ikatan Fe-N merupakan salah satu data struktur yang mengalami perubahan pada saat ion Fe (II) mengalami perubahan dari keadaan spin rendah ke keadaan spin tinggi. Berdasarkan hasil pengukuran terhadap struktur hasil visualisasi yang menunjukkan bahwa panjang ikatan Fe-N dari keadaan spin rendah lebih pendek dibandingkan dengan panjang ikatan Fe-N dari keadaan spin tinggi. Fenomena ini terjadi pada pada hasil perhitungan kimia komputasi pada berbagai fungsi/ basis set. Data panjang ikatan Fe-N hasil pengukuran terhadap struktur hasil perhitungan kimia komputasi pada fungsi/basis set B3LYP/6-31G(d) pada keadaan spin rendah adalah 1.960 – 2.089 Å dan pada keadaan spin tinggi 2,092 – 2,367 Å. Data tersebut sesuai dengan hasil pengukuran secara eksperimen pada keadaan spin rendah sebesar 1,827(5) Å – 1,981(6) Å dan pada keadaan spin tinggi 2,04(2) Å – 2,042(5)Å [29]. Data panjang ikatan Fe-N untuk kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ hasil perhitungan kimia komputasi pada fungsi/ basis set UHF/ 6-31G(d); set B3LYP/6-31G(d) dan TPSSh/TZVP dikemukakan pada Tabel 2.

Tabel 2 Panjang ikatan Fe-N hasil visualisasi data perhitungan kimia komputasi dengan beberapa fungsi/ basis set pada kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi

Fungsi/ basis set	Panjang ikatan Fe-N (Å)	
	Keadaan Spin Rendah	Keadaan Spin Rendah
UHF/6-31G(d)	2,093 – 2,230	2,148 – 2,444
B3LYP/6-31G(d)	1,960 – 2,089	2,092 – 2,367
TPSSh/ TZVP	1,950 – 2,033	2,100 – 2,481

Perhitungan kimia komputasi terhadap kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi pada fungsi / basis set UHF/6-31G(d), B3LYP/6-31G(d), dan TPPSh/ TZVP. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa data-data E, H, dan G hasil perhitungan pada fungsi / basis set UHF/6-31G(d) dan B3LYP/6-31G(d) terjadi penurunan pada proses perubahan dari keadaan spin rendah ke keadaan spin tinggi, tetapi hasil perhitungan pada fungsi/ basis set TPPSh/ TZVP diperoleh nilai ΔE, ΔH, dan ΔS positif dan ΔG negatif. Data-data hasil perhitungan kimia komputasi terhadap kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi pada fungsi / basis set UHF/6-31G(d) dikemukakan pada Tabel 4.

Tabel 4. Data termodinamika pada keadaan LS dan HS $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ hasil perhitungan kimia komputasi dengan fungsi hybrid/ basis set UHF/6-31G(d)

No	Fungsi termodinamika	Besaran (kJ/mol)		Selisih
		Spin rendah	Spin tinggi	
1	E (kJ/mol)	-26349818,721	-26350983,64	-1164,916
2	H (kJ/mol)	-26349816,242	-26350981.16	-1164,916
3	G (kJ/mol)	-26350342,634	-26351567,48	-1224,851
4	S (kJ/mol.K)	1,766	1,967	0,201

Data-data hasil perhitungan kimia komputasi terhadap kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi pada fungsi / basis set B3LYP/6-31G(d) dikemukakan pada Tabel 5.

Tabel 5. Data termodinamika pada keadaan LS dan HS $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ hasil perhitungan kimia komputasi dengan fungsi hybrid/ basis set B3LYP/6-31G(d)

No	Fungsi termodinamika	Besaran (kJ/mol)		Selisih
		Spin rendah	Spin tinggi	
1	E (kJ/mol)	-26426875,333	-26426926,76	-51,426
2	H (kJ/mol)	-26426872,855	-26426924,28	-51,426
3	G (kJ/mol)	-26427372,427	-26427507	-134,578
4	S (kJ/mol.K)	1,676	1,954	0,279

Data-data hasil perhitungan kimia komputasi terhadap kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ pada keadaan spin rendah dan keadaan spin tinggi pada fungsi / basis set TPPSh/ TZVP dikemukakan pada Tabel 6.

Tabel 6. Data termodinamika pada keadaan LS dan HS $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ hasil perhitungan kimia komputasi dengan fungsi hybrid/ basis set TPSSh/TZVP

No	Fungsi termodinamika	Besaran (kJ/mol)		Selisih
		Spin rendah	Spin tinggi	
1	E (kJ/mol)	-26432310,299	-26432226,85	83,449
2	H (kJ/mol)	-26432307,820	-26432224,37	83,449
3	G (kJ/mol)	-26432807,781	-26432810,12	-2,334
4	S (kJ/mol.K)	1,677	1,965	0,288

4. Kesimpulan

Data hasil perhitungan dengan UHF/6-31G(d) untuk jarak antar ion Fe(II) pada spin rendah 3,819Å–3,825Å, sedangkan pada spin tinggi 3,995Å–4,044Å, panjang ikatan Fe-N pada spin rendah 2,093Å–2,230Å, sedangkan pada spin tinggi 2,148Å–2,444Å, ΔH=-1164,916kJ/mol, ΔS=0,201kJ/mol.K, dan ΔG=-1224,851kJ/mol. Data hasil perhitungan dengan B3LYP/6-31G(d) untuk jarak antar ion Fe(II) pada spin rendah 3,661Å-3,680Å, sedangkan pada spin tinggi 3,911Å–3,946Å, panjang ikatan Fe-N pada spin rendah 1,960Å–2,089Å, sedangkan pada spin tinggi 2,092Å–2,367Å, ΔH=-51,426 kJ/mol, ΔS=0,279kJ/mol.K, dan ΔG=-134,578kJ/mol. Data hasil perhitungan dengan TPSSh/TZVP untuk jarak antar ion Fe(II) pada spin rendah 3,644Å–3,666Å sedangkan pada spin tinggi 3,883Å–3,914Å panjang ikatan Fe-N pada spin rendah 1,950Å–2,033Å, sedangkan pada spin tinggi 2,100Å–2,481Å, ΔH=83,449kJ/mol, ΔS= 0,288kJ/mol.K, dan ΔG=-2,334 kJ/mol.

Ucapan Terima Kasih
Penelitian ini didanai oleh Kementrian Pendidikan, Kubudayaan, Riset, dan Teknologi Republik Indonesia (No. 004/UN33.8/PL/DRPM-DJ/2021) dan Institut Teknologi Bandung (ITB) dalam pemakaian HPC dalam perhitungan kimia komputasi.

Daftar Pustaka:

[1] Herchel, R., Boca R., Gembicky M, Kozsek J., dan Renz F., 2004, Spin Crossover in a Tetranuclear Cr(III)-Fe(III)3 Complex, *J. Inorganic Chemistry*, **43**, 14, 4103 – 4105.

[2] Wu, C., Jung, J, Gantzel P.K., Gütlich P., dan Hendrickson, D. N., 1997, LIESST Effect Studies of Iron(II) Spin-Crossover Complexes with Phosphine Ligands: Relaxation Kinetics and Effects of Solvent Molecules, *J. Inorganic Chemistry*, **36**, 23, 5339 – 5347.

[3] Linares J., Codjovi E., dan Garcia Y., 2012, Pressure and Temperature Spin Crossover Sensors with Optical Detection, *Sensors*, **12**, 4479 - 4492

[4] Kahn O. dan Martinez, C. J., 1998, Spin-Transition Polymers: From Molecular Materials Toward Memory Devices, *Science*, **279**, 44, 44-48

[5] Kahn O. dan Codjovi O., 1996, Iron(II)-1,2,4-triazole spin transition molecular materials, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **354**, 359 - 379

[6] Bousseksou A., Molnár G., Demont P., dan Menegotto J, 2003, Observation of a thermal hysteresis loop in the dielectric constant of spin crossover complexes: towards molecular memory devices, *J. Mater. Chem*., **13**, 2069 - 2071

[7] Sugiyarto, K. H. dan Goodwin H A., 1994, Cooperative Spin Transitions in Iron (II) Derivatives of 1, 2, 4-triazole, *Aust J. Chem*, **47**, 263 – 277

[8] Lavrenova, L. G., Shakirova O. G., Ikorskii V. N., Varnek V. A., Sheludyakova L. A., dan Larionov S. V., 2003, 1A1 === 5T2 Spin Transition in New Thermochromic Iron (II) Complexes with 1,2,4-triazole and 4-amino-1,2,4-triazole, *Rusian Journal of Coordination Chemistry*, **29**, 1, 22 – 27

[9] Faulmann, C., Chahine, J., Malfant, I., Caro, D, d., Cormary, B., dan Valade, L., (2011): A facile route for the preparation of nanoparticles of the spin-crossover complex [Fe(Htrz)2(trz)](BF4) in xerogel transparent composite films, *Dalton Trans*, **40**, 2480 – 2485

[10] Kitchen, Jonathan A, Nicholas G. White, Maruta Boyd, Boujemaa Moubaraki, Keith s Murray, Peter D W Boyd, dan Sally Brooker, 2009, Iron (II) tris-[N4-substituted-3,5-di(2-pyridyl)-1,2,4-triazole] Complexes: Structural, Magnetic, NMR, and Density Functional Theory Studies, *Inorganic Chemistry*, **48**, 6670 – 6679.

[11] Wolny, Juliusz A., Hauke Paulsen, Alfred X. Trautwein, dan Volker Schünemann, 2009, Density functional theory calculations and vibrational spectroscopy on iron spin-crossover compounds, *Coordination Chemistry Reviews*, **253**, 2423–2431

[12] Cirera, J dan Paesani, F., 2012, A Theoretical Prediction of Spin-Crossover Temperatures in Ligand-Driven Light-Induced Spin Change Systems, *J. Inorg. Chem*, **51**, 8194−8201

[13] Nugraha, A. W., Onggo D, dan Martoprawiro, M. A., 2015, Computational study of structure and stability of polymeric complexes of Fe4(Htrz)8(trz)4]4+ and [Fe4(Htrz)12]8+, *Procedia Chemistry*, **17**, 9 – 15

[14] Nugraha, A. W., Onggo, D., Martoprawiro, M. A., 2019, Theoretical Study on Structure Prediction and Molecular Formula Determination of Polymeric Complexes Comprising Fe(II) and 1,2,4-H-Triazole Ligand. *Russ. J. Inorg. Chem*. **64**, 755–761.

[15] Nugraha, A. W., Z Muchtar, J. L. Sihombing, dan I. S. Jahro, 2019, Study of Thermodynimic and Structure of Cu(II) 1,2,4 H-triazol complex using The ab Initio Method, European Union Digital Lybrary Proceedings

[16] Nugraha, A. W., Jahro, I. S., Onggo, D., Martoprawiro, M. A., 2020. Study of thermodynamics and complex structures on spin transitions of $[Fe_2(Htrz)_6(trz)_3]Cl$ and $[Fe_4(Htrz)_{10}(trz)_5]Cl_3$ complexes using the Density Functional Theory method, *J. Phys.: Conf. Ser*. **1462**, 012045.

[17] Ibarra-Rodríguez, M., Muñoz-Flores, B. M., Dias, H. V. R., Hernández-Ahuactzi, I. F., Sánchez, M., Jiménez-Pérez, V.M., 2019, Amine adduct with tin (II) chloride: Synthesis, molecular structure characterization, and DFT computational studies. *Arab. J. Chem*., **12**, 5120–5124.

[18] Zein, Samir, Galina S. Matouzenko, and Serguei A. Borshch, 2005, Quantum Chemical Study of Three Polymorphs of the Mononuclear Spin-Transition Complex [Fe(DPPA)(NCS)2], *J. Phys. Chem. A*, **109**, 38, 8568 - 8571.

[19] Güell, Mireia, Josep M. Luis, Miquel Sola`, dan Marcel Swart, 2008, Importance of the Basis Set for the Spin-State Energetics of Iron Complexes, *J. Phys. Chem. A*, **112**, 28, 6384–6391.

[20] Kuiken, Benjamin E. Van dan Munira Khalil, 2011, Simulating Picosecond Iron K-Edge X-ray Absorption Spectra by ab Initio Methods To Study Photoinduced Changes in the Electronic Structure of Fe(II) Spin Crossover Complexes, *J. Phys. Chem. A*, **115**, 10749–10761

[21] Furukawa Shinya, Yutaka Hitomi, Tetsuya Shishido, Kentaro Teramura, dan Tsunehiro Tanaka, 2011, π Back-Bonding of Iron(II) Complexes Supported by Tris(pyrid-2-ylmethyl)amine and Its Nitro-

Substituted Derivatives, *J. Phys. Chem. A*, **115**, 13589–13595

[22] Dirtu, M. M., Neuhausen, C., Naik, A. D., Rotaru, A., Spinu, L., dan Garcia, Y., 2010, Insights into the Origin of Cooperative Effects in the Spin Transition of [Fe(NH2trz)3](NO3)2: the Role of Supramolecular Interactions Evidenced in the Crystal Structute of [Cu(NH2trz)3](NO3)2.H2O, *Inorganic Chemistry*, **49**, 5723-5736.

[23] Frisch M. J., G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

[24] Jmol Team, 2016. Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D Jmol icon with features for chemicals, crystals, materials and biomolecules.

[25] Hanwell M. D., Curtis D. E., Lonie D. C., Vandermeersch T., Zurek E., dan Hutchison G. R.; "Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform" Journal of Cheminformatics 2012, 4:17

[26] Ochterski, Joseph W., 2000, Thermochemistry in Gaussian, help@gaussian.com

[27] Michalowicz, A., Moscovici, J., Ducourant, B., Cracco, D., dan Kahn, O., 1995, EXAFS and X-ray Powder Diffraction Studies of Spin Transition Molecular Materials [Fe(Htrz)2(trz)](BF4) and [Fe(Htrz)3](BF4)2.H2O (Htrz = 1,2,4-HH-triazole; trz = 1,2,4-triazolato), *Chem Mater*, **7**, 1833 – 1842.

[28] Verelst Marc, Line Sommier, Pierre Lecante, Alain Mosset, dan Olivier Kahn, 1998, Structural Study by Wide-Angle X-ray Scattering of the spin transition molecular materials [Fe(Htrz)2(trz)](BF4) and [Fe(NH2trz)3](NO3)2 (Htrz = 1,2,4-4H-triazole, trz = 1,2,4-triazolato), *Chem. Mater*., **10**, 980 – 985.

[29] Urakawa Atsushi, Wouter Van Beek, María Monrabal-Capilla, Josè Ramòn Galán-Mascaròs, Luca Palin, dan Marco Milanesio, 2011, Combined, Modulation Enhanced X-ray Powder Diffraction and Raman Spectroscopic Study of Structural Transitions in the Spin Crossover Material [Fe(Htrz)2(trz)](BF4), *J. Phys. Chem. C*, **115**, 1323-1329.