

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Perkembangan pesat teknologi mikroprosesor telah mempengaruhi perkembangan ilmu kimia. Penggunaan komputer sebagai peralatan kerja laboratorium dikembangkan menjadi suatu aspek kajian yang disebut dengan kimia komputasi. (Siswanta Dwi & Nugraha Gerry, 2017). Kimia komputasi adalah cabang ilmu kimia yang memanfaatkan program komputer untuk menghitung parameter-parameter yang dimiliki oleh atom. Parameter yang selalu dilibatkan dalam perhitungan ini adalah elektron-elektron yang dimiliki oleh atom. Dengan perhitungan ini, atom atau senyawa dapat dipelajari secara lengkap tanpa melalui studi empiris di laboratorium. Studi ini dapat memenuhi kebutuhan informasi tentang materi kimia yang sulit diperoleh dari studi laboratorium karena obyek yang susah dideteksi, kondisi reaksi yang berbahaya, dan faktor-faktor yang lain (Asmara, 2015).

Dalam kimia komputasi terdapat suatu metode yang akan digunakan untuk mengetahui energi dan keadaan dasar suatu atom atau senyawa yaitu metode Density Functional Theory (*DFT*)/ Teori Fungsi Kerapatan. Density Functional Theory (*DFT*)/Teori Fungsi Kerapatan adalah metode pencarian energi menggunakan kerapatan muatan. Teori ini merupakan salah satu dari beberapa pendekatan populer untuk perhitungan struktur elektron banyak partikel secara mekanika kuantum untuk sistem molekul dan bahan padat. Metode tradisional dalam perhitungan struktur elektron, seperti teori Hartree-Fock di dasarkan pada fungsi gelombang banyak

elektron yang rumit. Sasaran utama dari teori fungsi kerapatan adalah menggantikan fungsi gelombang elektron banyak partikel dengan kerapatan elektron sebagai besaran dasarnya.

Seiring dengan berkembangnya zaman, kemajuan simulasi dan pemodelan terutama kimia komputasi Teori Fungsi Kerapatan(DFT) ini dapat memberikan pengaruh dalam menurunkan biaya dan juga waktu yang diperlukan untuk mendesain proses kimia dan juga dapat menghasilkan hasil yang signifikan dengan hasil laboratorium (Aldo Swazty saputra & I Gusti Made sanjaya, 2014) kajian teoritis untuk menentukan celah energi kompleks 8-Hidroksiquinolin terkonjugasi logam besi dengan menggunakan teori kerapatan fungsional (DFT). Hasil penelitian menunjukkan celah energi 8-Hidroksiquinolin terkonjugasi logam Fe adalah $1.090003eV$. Oleh karena itu senyawa Fe-8HQ berpotensi untuk dijadikan detektor (sensor) inframerah yang baik. Dalam penelitian ini akan dilakukan studi komputasi kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan metode *density functional theory* (DFT).

B. Identifikasi Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas dapat diidentifikasi permasalahan sebagai berikut:

1. Kajian dan pemodelan komputasi kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan metode *density functional theory* (DFT).

2. Penentuan deskriptor melalui perhitungan secara komputasi untuk mengetahui kereaktifan dengan DFT dalam memprediksi kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni, Zn menggunakan metode density functional theory (DFT).

C. Batasan Masalah

1. Senyawa kompleks yang digunakan adalah kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn.
2. Penentuan deskriptor kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan metode DFT.
3. Pemodelan untuk memprediksi aktivitas struktur kompleks fenantrolin menggunakan program metode *DFT*.

D. Rumusan masalah

Berdasarkan uraian latar belakang diatas maka permasalahan yang timbul yaitu:

1. Bagaimana memodelkan kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan DFT?
2. Bagaimana aktivitas kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan DFT?

E. Tujuan

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan yaitu :

1. Untuk mengetahui pemodelan struktur senyawa komputasi kompleks 1,10 fenantrolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan DFT

2. Untuk mengetahui aktivitas kompleks 1,10 fenantroline dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan DFT.

F. Manfaat penelitian

Penelitian ini diharapkan agar mampu memberikan manfaat kepada:

1. Peneliti untuk dapat menambah wawasan pengetahuan dalam bidang ilmu kimia.
2. Bidang pendidikan, sebagai panduan praktikum pada matakuliah kimia komputasi untuk pemodelan kompleks 1,10 fenantroline dengan logam Fe, Cu, Co, Ni, dan Zn menggunakan DFT pada penelitian mendatang.
3. Masyarakat, sebagai data atau informasi tentang prediksi aktivitas struktur kompleks 1,10 fenantroline dengan logam Fe, Cu, Co, Ni dan Zn menggunakan DFT secara kimia komputasi.