

BAB I PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Seiring berkembangnya waktu kemajuan teknologi komputer saat ini telah memberikan suatu inovasi baru dalam bidang kimia dengan munculnya kimia komputasi, sehingga permasalahan perhitungan untuk molekul yang kompleks bisa teratasi. Salah satu metode yang digunakan untuk perhitungan secara komputasi adalah Density Functional Theory (DFT). Metode ini memiliki keuntungan dibanding metode sebelumnya seperti *ab initio* dan semi empiris karena dapat menghitung suatu senyawa kompleks dengan lebih sederhana dan cepat dengan hasil yang tidak jauh berbeda dari data eksperimen. Metode Density Functional Theory (DFT) mengandalkan densitas elektron sebagai besaran dasarnya sehingga persamaan Scrodinger dapat diselesaikan dengan lebih sederhana. Untuk sistem logam transisi, pada umumnya metode Density Functional Theory (DFT) mengarah pada struktur dan vibrasi energi yang lebih akurat dibandingkan dengan metode HF. Metode ini telah menjadi metode pilihan untuk senyawa logam transisi.

Senyawa kompleks menjadi suatu bidang kajian kimia yang sangat banyak diminati oleh para peneliti dan telah banyak diakui kegunaannya. Pembuatan senyawa kompleks menggambarkan fenomena yang sangat menarik di dalam ilmu kimia, sebab memiliki sifat-sifat yang unik. Senyawa kompleks sering kali dipergunakan untuk kepentingan analisis kuantitatif ataupun kualitatif, baik unsur maupun senyawa, kation ataupun anion. Senyawa kompleks terdiri dari atom pusat sebagai kation yang berfungsi

sebagai asam Lewis, sebaliknya ligan yang umumnya berbentuk anion ataupun molekul netral dapat berfungsi sebagai basa Lewis (Suhartana 2007).

Telah banyak dilakukan penelitian sebelumnya mengenai penggunaan metode Density Functional Theory (DFT) antara lain: meramalkan struktur elektronik dan sifat transisi spin kompleks (Male, Onggo, and Martoprawiro 2009); memprediksi energi dan geometri senyawa (Li et al., 2003); mempelajari termokimia reaksi dan vibrasi (Becke 2003); mempelajari pengaruh isotop terhadap mekanisme reaksi (Ashley, Brinkley, and Roth 2010); serta menghitung energi bebas kompleks transisi spin (Paulsen 2006).

Ditiokarbamat merupakan ligan pengkelat yang membentuk kompleks stabil dengan semua unsur transisi serta mayoritas unsur golongan utama (Noor, Raya, and Pratapa 2016). Pengkompleksan logam dengan ligan dalam hal ini ditiokarbamat tidak lepas dari prinsip HSAB (Hard and Soft Acid Base), asam keras dengan basa keras, asam lunak dengan basa lunak. Ditiokarbamat merupakan basa lunak sehingga ditiokarbamat akan lebih menyukai logam yang bersifat asam lunak. Ion logam Ni^{2+} , Zn^{2+} , dan Pt^{2+} keduanya merupakan asam menengah yang bersifat asam yang sedikit lunak dan sedikit keras (Nurillah 2010). Ligan ditiokarbamat serta homolognya banyak digunakan dalam bidang farmasi, medis serta biokimia. Ditiokarbamat dapat berfungsi sebagai khelat monodentat serta bidentat. Ligan ditiokarbamat memiliki banyak konsideration dalam beberapa tahun terakhir karena kemampuannya untuk bertindak sebagai ligan bidentat (Islam et al. 2016). Ligan ditiokarbamat seperti dietil ditiokarbamat dan pirolidin

ditiokarbamat menampilkan sifat sitotoksik dan kedua ligan tersebut telah digunakan untuk melawan sifat racun logam. Ligan ditiokarbamat telah banyak dilakukan penelitian dalam bidang, yaitu dalam bidang pertanian, kedokteran, industri, kimia analitik dan organik. (Hendrati et al. 2018).

Penelitian-penelitian sebelumnya sudah banyak mengkaji mengenai pembuatan senyawa kompleks dengan memakai ligan turunan ditiokarbamat pada logam transisi antara lain kompleks bis(dibutilditiokarbamat) Zink(II) bis(N-sek-butil-Npropilitiokarbamato) zink(II) serta bis(N-sek-butil-Npropilitiokarbamato) Platinum(II) praseodimium ditiokarbamat 1,10-fenantrolin, disprosium ditiokarbamat dengan ligan 1,10-fenantrolin serta 3,4,7,8-tetrametilfenantrolin, lutenium dibutilditiokarbamat sebagai kompleks (Hendrati et al. 2018).

Menurut hasil penelitian Desy Kartina (2013) menyatakan bahwa diperoleh enam senyawa kompleks yang telah berhasil disintesis yaitu, Zn(II)EtiPrDtc, Zn(III)MeHepDtc, Zn(II)MeIsoButDtc, Te(IV)EtiPrDtc, Te(IV)MeHepDtcPhen, dan Te(IV)MeIsDtc Phen. Khusus untuk senyawa Zn(II)MeIsoButDtc dan Te(IV) MeIsoButphen dikarakterisasi menggunakan spektroskopi NMR. Keseluruhan Senyawa kompleks yang telah berhasil disintesis menunjukkan potensial bioaktivitas bakteri (Kartina 2013).

Pengujian senyawa ditiokarbamat dari beberapa penelitian dilakukan secara uji laboratorium atau ekperimental dilaboratorium, sehingga membutuhkan biaya yang cukup banyak dan waktu yang relatif lama. Oleh karena itu, maka perlu dilakukan suatu teknik penelitian yang lebih efisiensi

waktu dan juga biaya, salah satunya yaitu dengan menggunakan teknik komputasi.

Pada penelitian ini, kimia komputasi sangat bermanfaat dalam pengujian metode dan peramalan reaksi. Dalam pengujian metode, sifat molekul atau sistem kimia misalnya struktur, energi dan dinamika sistem molekul yang dikaji langsung dapat dibandingkan dengan hasil eksperimen. Kimia komputasi juga bermanfaat untuk meramalkan struktur, mekanisme dan energetika reaksi yang terjadi dilaboratorium sehingga kimiawan dapat mendesain struktur dan meramalkan sifat suatu senyawa sebelum melakukan sintesis (Cramer 2004).

Berdasarkan uraian latar belakang diatas, maka telah dilakukan penelitian dengan judul **Density Finctional Theory Senyawa Kompleks Ni²⁺, Zn²⁺ dan Pt²⁺ Pirolidin-Ditiokarbamat.**

B. Identifikasi Masalah

Berdasarkan uraian latar belakang di atas dapat diidentifikasi permasalahan-permasalahan sebagai berikut:

1. Permodelan dan optimasi geometri senyawa kompleks logam Ni²⁺, Zn²⁺ dan Pt²⁺ dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat melalui pendekatan secara komputasi.
2. Penentuan deskriptor elektronik senyawa kompleks Ni²⁺, Zn²⁺ dan Pt²⁺ dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat melalui metode Density Functional Theory secara komputasi.

C. Batasan Masalah

Berdasarkan uraian identifikasi masalah diatas, maka batasan masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Senyawa kompleks yang digunakan adalah 3 logam senyawa kompleks yaitu Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+}
2. Penentuan deskriptor elektronik 3 logam senyawa kompleks Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory (DFT)

D. Rumusan Masalah

Berdasarkan uraian batasan masalah diatas, maka dapat rumusan permasalahannya sebagai berikut:

1. Bagaimana permodelan dan optimasi geometri senyawa kompleks logam Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory (DFT)?
2. Bagaimana deskriptor elektronik senyawa kompleks logam Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory (DFT)?

E. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas maka tujuan penelitian ini adalah:

1. Untuk mengetahui permodelan dan optimasi geometri senyawa kompleks logam Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory (DFT)

2. Untuk mengetahui deskriptor elektronik senyawa kompleks logam Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory (DFT)

F. Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dari penelitian ini yang dapat dijelaskan sebagai berikut:

1. Bagi peneliti, untuk dapat menambah wawasan pengetahuan dalam bidang ilmu kimia khususnya kimia komputasi.
2. Bidang pendidikan, sebagai panduan praktikum pada matakuliah kimia komputasi untuk pemodelan, optimasi geometri dan penentuan deskriptor senyawa kompleks logam Ni^{2+} , Zn^{2+} dan Pt^{2+} dengan ligan pirolidin-ditiokarbamat menggunakan metode Density Functional Theory (DFT) secara kimia komputasi.