



Studi Komputasi Perhitungan Celah Energi Dan Analisis UV Senyawa Kompleks Bis(Benzoil Trifluoro Asetonato)₂Fe Menggunakan Metode Semi Empiris PM3

Wella Apriwidyanti, Universitas Negeri Medan, Indonesia
Muhammad Yusuf, Universitas Negeri Medan, Indonesia
Avillia Wiranda Putri, Universitas Negeri Medan, Indonesia
Muhammad Farhan, Universitas Negeri Medan, Indonesia
Nur Anisa Anggita, Universitas Negeri Medan, Indonesia
Frengky Sanjaya Ginting, Universitas Negeri Medan, Indonesia
Sri Rahayu, Universitas Negeri Medan, Indonesia

ABSTRACT

This study was conducted to analyze the energy gap and UV-VIS spectroscopy of complex compounds Bis(btfa)₂Fe and btfa ligand compounds using the semi-empirical PM3 method to optimize their geometric structure so that the energy values of HOMO and LUMO are optimally obtained. The results of the calculations show that this complex has a stable geometric structure in accordance with the experiment. The presence of the Fe atom as the central atom in the complex compound Bis(btfa)₂Fe affects the calculation of the energy gap value from 9.062865 eV to 7.921345 eV. The presence of the Fe atom as the center of the molecule leads to an increase in its maximum wavelength which can then be used as a basis for research in the laboratory and can design complexes with new transition metals that are potentially applied in catalysis and functional materials.

ARTICLE HISTORY

Submitted 16/10/2024
Revised 05/11/2024
Accepted 29/11/2024

KEYWORDS

Bis(Benzoil Trifluoro Asetonato)₂Fe; studi komputasi; semi empiris PM3; celah energi; transisi elektronik

CORRESPONDENCE AUTHOR

✉ myusuf@unimed.ac.id

DOI: <https://doi.org/10.30743/cheds.v7i1.10025>

1. PENDAHULUAN

Seiring dengan kemajuan teknologi dan ilmu pengetahuan, banyak perubahan terjadi dalam penelitian ilmiah. Salah satu perubahan tersebut adalah munculnya disiplin ilmu baru yang dikenal sebagai kimia komputasi. Kimia komputasi memungkinkan perhitungan kimia dilakukan dengan bantuan komputer untuk menjelaskan fenomena eksperimen kimia. Penggunaan komputer dalam kimia komputasi tidak hanya terbatas pada visualisasi struktur, tetapi juga untuk menyelesaikan masalah di bidang kimia, termasuk studi molekuler yang melibatkan sistem makroskopis. Oleh karena itu, komputer memiliki peran penting dalam perkembangan ilmu pengetahuan yang kini dikenal sebagai kimia komputasi dalam eksperimen berbasis komputer. Dalam eksperimen komputer, perhitungan dilakukan melalui algoritma yang kemudian diimplementasikan dalam bahasa pemrograman. Pendekatan ini memungkinkan perhitungan berbagai sifat molekul yang kompleks dengan hasil yang mendekati eksperimen di laboratorium. (Muslim and Sudarlin, 2019; Yusuf, 2017).

Dalam eksperimen berbasis komputer, perhitungan dilakukan melalui algoritma yang kemudian diterjemahkan ke dalam bahasa pemrograman. Metode ini memungkinkan penghitungan berbagai sifat molekul kompleks dengan hasil yang mendekati hasil eksperimen laboratorium (Muslim dan Sudarlin, 2019; Yusuf, 2017).

Pada penelitian sebelumnya (Yusuf dkk., 2023), telah dilakukan studi komputasi untuk menghitung celah energi dan analisis UV dari kompleks bis(benzoil trifluoro asetonato)₂Zr. Hasil penelitian ini berupa data celah energi dan spektrum transisi elektronik yang dapat menjelaskan tahapan mekanisme reaksi, memfasilitasi percobaan laboratorium. Oleh karena itu, hasil studi komputasi sangat relevan untuk diaplikasikan pada berbagai senyawa kompleks guna memperkirakan sifat kimianya, sehingga senyawa tersebut dapat digunakan dalam percobaan laboratorium untuk membantu peneliti dalam perancangan awal penelitian.

Berdasarkan uraian tersebut, dilakukan penelitian komputasi terhadap senyawa kompleks bis(benzoil trifluoro asetonato)₂Fe, dengan menghitung selisih energi menggunakan metode semi-empiris PM3. Penelitian ini juga mencakup



perhitungan spektrum transisi elektronik UV untuk menentukan panjang gelombang maksimum senyawa kompleks tersebut.

2. METODE PENELITIAN

2.1 Jenis Penelitian

Penelitian ini menggunakan metode deskriptif kuantitatif, yang bertujuan untuk memberikan gambaran lengkap dari data, baik dalam bentuk verbal maupun numerik, terkait objek yang diteliti melalui studi pustaka guna memperkuat analisis. Data yang diperoleh dianalisis secara deskriptif kuantitatif dan disajikan dalam tabel serta grafik agar memudahkan interpretasi dan penarikan kesimpulan (Zumairah dkk, 2022). Penelitian ini berfokus pada penyediaan data mengenai sifat senyawa kompleks Bis(Benzoil Trifluoro asetonato)₂Fe, berdasarkan perhitungan komputasi terkait celah energi dan spektrum transisi elektronik. Metode yang digunakan adalah metode semiempiris PM3. Alat dan bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah perangkat keras yang berupa laptop Asus dengan spesifikasi RAM 5 GB DDR4, prosesor AMD Ryzen 3-3250U, layar 14 inci Full HD, kartu grafis AMD, serta sistem operasi Windows 11. Laptop ini dilengkapi dengan software Hyperchem 8.0 yang digunakan untuk melakukan perhitungan, termasuk visualisasi molekul, optimasi geometri, celah energi, dan spektrum UV.

2.2 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan di laboratorium kimia Universitas Negeri Medan, yang berlokasi di Jalan Willem Iskandar Pasar V Medan Estate, Kabupaten Deli Serdang, Kota Medan, Provinsi Sumatera Utara. Penelitian ini dimulai pada bulan Juni 2024.

2.3 Target/Subjek Penelitian

Penelitian ini berfokus pada senyawa kompleks Bis(Benzoil Trifluori Asetonato)₂Fe dengan memanfaatkan perangkat lunak Hyperchem untuk menentukan nilai HOMO, LUMO, dan celah energi. Hasil penelitian ini menunjukkan perlunya pengembangan lebih lanjut dalam studi terkait senyawa kompleks.

2.4 Prosedur

2.4.1. Optimasi Geometri

Tahap pertama melibatkan pemodelan ligan BTFA dan senyawa kompleks bis(BTFA)₂Fe menggunakan Hyperchem. Molekul tersebut kemudian dikonversi ke bentuk tiga dimensi dan dioptimasi menggunakan opsi invoke model builder yang terdapat di menu. Setelah itu, dilakukan optimasi geometri senyawa tersebut dengan metode semiempiris PM3 (Yusuf & Nasution, 2022).

2.4.2. Penentuan Celah Energi

Setelah struktur senyawa mencapai kestabilan, langkah selanjutnya adalah menghitung celah energinya dengan mengklik menu compute, kemudian memilih orbitals. Penyesuaian standar LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) dan HOMO (highest unoccupied molecular orbital) dilakukan dengan mengatur nilainya menjadi 0. Selanjutnya, opsi labels dan plot dipilih. Setelah nilai LUMO dan HOMO diperoleh, perhitungan celah energi dilakukan (Sanjaya & Saputra, 2014; Siregar & Sinaga, 2017).

2.4.3. Analisis Spektra Transisi Elektronik (UV)

Senyawa yang telah mencapai struktur stabil kemudian dihitung spektrum transisi elektroniknya dengan memilih menu compute, lalu opsi single point. Selanjutnya, dipilih Single Point CI dengan metode singly excited. Setelah perhitungan selesai, spektrum elektronik akan dihasilkan (Yusuf dkk, 2023).

2.5 Data, Instrumen, dan Teknik Pengumpulan Data

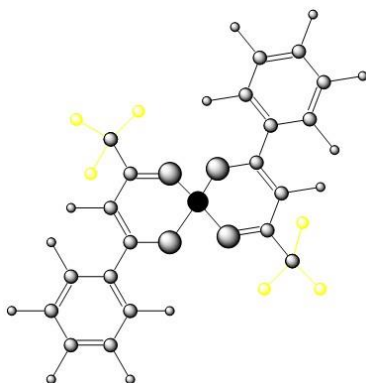
Data yang diperoleh mencakup nilai HOMO, LUMO, celah energi, dan panjang gelombang UV yang dihasilkan menggunakan perangkat lunak Hyperchem.

2.6 Teknik Analisis Data

Instrumen yang digunakan, yaitu Hyperchem, menghasilkan nilai celah energi yang diperoleh dari selisih antara energi LUMO dan energi HOMO (Muslim & Sudarlin, 2019), serta nilai panjang gelombang maksimum berdasarkan spektrum transisi elektronik.

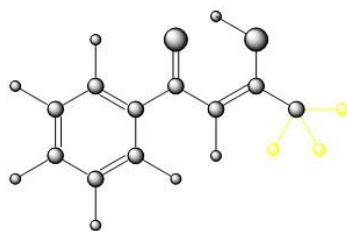
3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Langkah pertama yang dilakukan adalah pemodelan molekul ligan *benzoil trifluoro asetonato* dan senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoro asetonato*)₂Fe. Setelah itu, dilakukan optimasi geometri dengan menggunakan perangkat



Gambar 1. Struktur senyawa kompleks Bis(btfa)₂Fe

lunak Hyperchem. Berikut adalah hasil pemodelan molekul ligan *benzoil trifluoro asetonato* dan senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoro asetonato*)₂Fe setelah optimasi geometri menggunakan metode semi-empiris *benzoil trifluoro asetonato*.



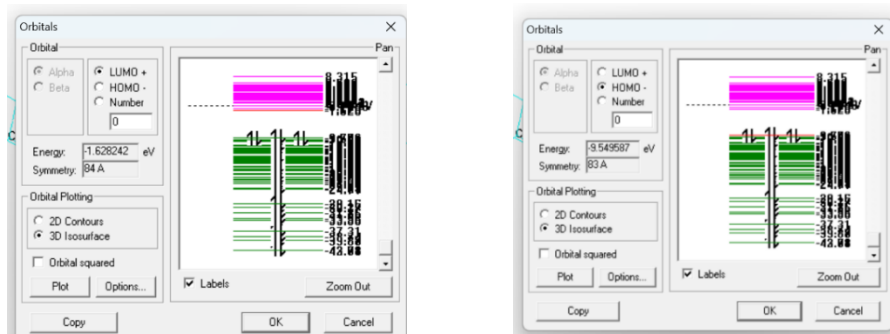
Gambar 2. Struktur ligan btfa

3.1 Celah Energi

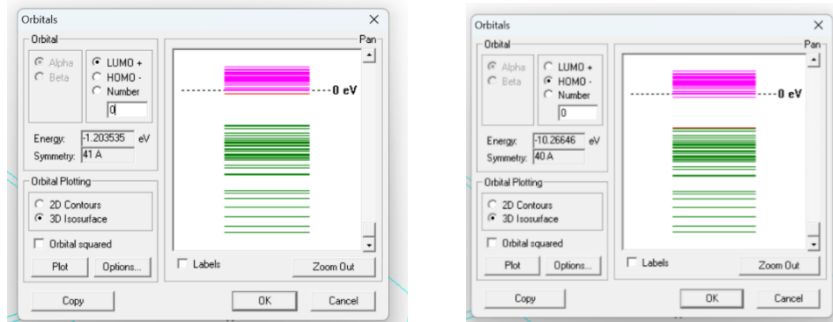
Setelah diperoleh nilai HOMO dan LUMO, band gap (celah energi) pada ligan *benzoil trifluoro asetonato* dan senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoro asetonato*)₂Fe dapat dihitung. Celah energi ini merupakan selisih antara nilai HOMO dan LUMO (Yusuf, 2023).

$$E_{\text{gap}} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

Dari tabel, terlihat bahwa nilai band gap pada ligan *benzoil trifluoro asetonato* lebih besar dibandingkan dengan senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoro asetonato*)₂Fe. Kehadiran atom pusat Fe menyebabkan penurunan band gap secara signifikan. Band gap yang rendah pada senyawa kompleks menunjukkan bahwa senyawa tersebut lebih mudah mengalami eksitasi dibandingkan dengan ligan, karena jarak antara pita valensi dan pita konduksi semakin kecil (Indriani & Fahyuan).



Gambar 3. Nilai HOMO dan LUMO senyawa kompleks bis(btfa)₂Fe



Gambar 4. Nilai HOMO dan LUMO senyawa ligan btfa

Nilai celah energi untuk isolator adalah lebih dari 4 eV, sedangkan untuk semikonduktor kurang dari 3 eV. Oleh karena itu, senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoro asetonato*)₂Fe bersifat isolator (Dharma et al., 2009). Nilai celah energi yang besar pada senyawa kompleks disebabkan oleh keelektronegatifan atom Fluor.

Dari hasil penelitian yang telah dilakukan, diperoleh data sebagai berikut:

Senyawa	E.LUMO (eV)	E.HOMO (eV)	Celah Energi (eV)
Btfa	-1,203535	-10,2664	9,062865
Bis(btfa) ₂ Fe	-1,628242	-9,549587	7,921345

Perhitungan celah energi menunjukkan bahwa ligan memiliki celah energi yang lebih besar dibandingkan dengan kompleks bis(*benzoil trifluoroasetonato*)₂Fe. Diketahui bahwa senyawa dengan celah energi yang lebih sempit cenderung lebih sensitif terhadap cahaya. Oleh karena itu, ketika senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoroasetonato*)₂Fe menerima energi dari luar, elektron akan lebih mudah berpindah dari HOMO ke LUMO dibandingkan dengan ligan. Hal ini disebabkan oleh semakin kecilnya celah energi suatu senyawa, semakin bersifat konduktor senyawa tersebut (Siregar & Sinaga, 2017). Hal ini disebabkan oleh koordinasi elektron bebas pada atom O dengan atom pusat Fe, yang membuat senyawa kompleks menyerap cahaya pada panjang gelombang yang lebih panjang daripada ligan. Pengamatan ini menunjukkan bahwa keberadaan atom Fe di pusat kompleks menyebabkan peningkatan panjang gelombang maksimum.

Senyawa kompleks yang terbentuk lebih stabil dibandingkan ligan. Hal ini disebabkan oleh koordinasi elektron bebas pada atom O dengan atom pusat Fe. Sementara itu, pada ligan, atom O masih memiliki pasangan elektron bebas. Ligan yang digunakan dalam senyawa kompleks memiliki gugus penarik elektron pada atom F, sehingga elektron pada atom pusat Fe dapat tertarik oleh atom F (Azuxetullatif et al., 2020; Imelda & Aziz, 2022; Yusuf, 2023). Proses ini bertujuan untuk meningkatkan keasaman Lewis atom Fe agar dapat dimanfaatkan sebagai katalis asam.

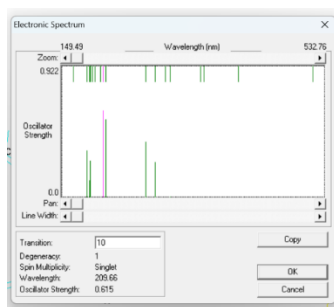
3.2 Spektra UV

Senyawa kompleks bis(*benzoil trifluoro asetonato*)₂Fe memiliki celah energi yang lebih besar dibandingkan dengan ligan *benzoil trifluoro asetonato*. Akibatnya, senyawa kompleks ini akan menyerap cahaya pada panjang gelombang yang lebih tinggi dibandingkan dengan ligan *benzoil trifluoro asetonato*. Keberadaan atom Fe sebagai pusat molekul menyebabkan peningkatan panjang gelombang maksimum. Hasil yang ditunjukkan dalam tabel sesuai dengan persamaan energi foton, di mana berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Yusuf (2023), energi berbanding terbalik dengan panjang gelombang maksimum. Secara sistematis, persamaan tersebut dapat ditulis sebagai berikut:

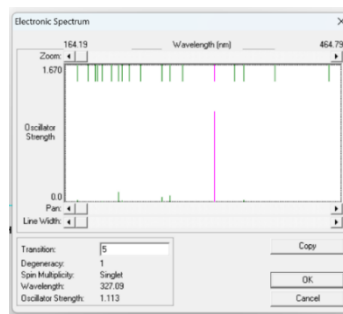
$$E = h \cdot c / \lambda$$

Dengan E= energi, c= kecepatan cahaya, h=tetapan planck, λ = Panjang gelombang

Senyawa	Panjang Gelombang Maksimum (nm)
Btfa	209,66 nm
Bis(btfa) ₂ Fe	327,09 nm



Gambar 6. Spektrum UV senyawa ligan btfa



Gambar 1. Spektrum UV senyawa kompleks bis(btfa)₂Fe

4. SIMPULAN DAN SARAN

4.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa celah energi ligan btfa sebesar 9,062865 eV dan celah energi senyawa kompleks bis(btfa)₂Fe sebesar 7,921345 eV. Senyawa kompleks bis(btfa)₂Fe lebih mudah mengalami eksitasi dibandingkan dengan ligan btfa. Sedangkan untuk spektra UV ligan btfa sebesar 209,66 nm dan spektra UV senyawa kompleks bis(btfa)₂Fe sebesar 327,09 nm. Hasil temuan spektra UV ini sejalan dengan persamaan energi foton yang menyatakan bahwa energi berbanding terbalik dengan panjang gelombang maksimum.

4.2 Saran

Meskipun penelitian ini menghadapi tantangan tersendiri, hasil yang diperoleh cukup memuaskan sebagai langkah awal menuju penelitian berikutnya. Namun, penulis berharap penelitian ini dapat dikembangkan lebih lanjut dengan menggunakan jenis logam lain sebagai atom pusat kompleks, serta ligan yang berbeda, sehingga hasil yang diperoleh bisa dibandingkan dengan penelitian sebelumnya. Laporan ini kami sampaikan, dengan kesadaran bahwa tulisan ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan kritik dan saran yang membangun.

5. UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terimakasih kepada LPPM UNIMED yang telah membantu dana penelitian melalui Hibah Student Grant dengan No. Kontrak : 189/UN33.8/PPKM/PSG/2024. Penulis juga mengucapkan terimakasih kepada Kemendikbudristek RI untuk pendanaan penelitian ini, yang berasal dari Dana DIPA DRTPM Ditjen Dikristek, No. SPA DIPA-023.17.1.690523/2024.

6. DAFTAR PUSTAKA

- Azuxetullatif, Emriadi, Syukri, Untari P. Mempelajari Senyawa Mirisitrin Dengan Penambahan Substituen NH₂, NO₂, dan CH₃ Sebagai Inhibitor Korosi Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT). *Chempublish J* [Internet]. 2020;5(2):166–78. Available from: <https://doi.org/10.22437/chp.v5i2.11347>
- Imelda I, Aziz H. MODIFIKASI STRUKTUR ZAT WARNA BERBASIS TRIFENILAMIN UNTUK MENINGKATKAN KINERJA Dye-SENSITIZED SOLAR CELLS (DSSCs): METODE *J Res Educ Chem*. 2022;4(1):34–49.
- Dharma. (2009). UV/Vis/NIR Spectrometer. *PerkimElmer*. USA
- Fajri, L. (2017). Analisis Kemampuan Memori Mahasiswa Prodi Pendidikan Sains Pada Materi Tata Nama Senyawa Kompleks. *JEMS: Jurnal Edukasi Matematika dan Sains*, 5(1), 18-24.
- Indriani, D. & Fahyuan, H. D. 2018. Uji UV-Vis Lapisan TiO₂/N₂ Untuk Menentukan Band Gap Energy. *J. Online Phys*. 3(2), 6-10
- Muslim MI, Sudarlin S. Theoretical Study on the Use Cyano Acid Derivation as Electron Acceptors in Pelargonidin as Dye Compounds of Sensitized Solar Cells (DSSC). *J Kim Sains dan Apl*. 2019;22(4):123–8.
- Pranowo, H. D. (2011). *Pengantar Kimia Komputasi*. 4-5:118.
- Prianto, B. (2010). Pemodelan kimia komputasi. *Berita Dirgantara*, 8(1). Sembiring, Z., Bahri, S., Rinawati,

- R., Ramadhania, A. S., & Fiarizky, A. D. (2021). Pengaruh Ligan Pada Sintesis Senyawa Kompleks Co (II) Dengan Ligan Basa Schiff N, N-Dimetil-4-(Feniliminometil) Anilin Dan 1, 10- Fenantrolin. *Analit: Analytical and Environmental Chemistry*, 6(2), 180- 188.
- Sanjaya, I Gusti Made & Saputra A.S., 2014. Kajian Teoritis Untuk Menentukan Celah Energi Kompleks 8-Hidroksiquinolin Terkonjugasi Logam Besi Dengan Menggunakan Teori Kerapatan Fungsional. *UNESA J. Chem.* Vol. 3, 1– 10.
- Silfadani, L. H., Fakhri, T. M., & Wisnuwardhani, H. A. (2022, August). Desain Biosensor Berbasis Nanopartikel Perak untuk Deteksi Protein Hemoglobin pada Babi secara In Silico. In *Bandung Conference Series: Pharmacy* (Vol. 2, No. 2, pp. 947-956).
- Siregar AM, Sinaga HJ. Studi Penentuan Semikonduktor Melalui Kajian Celah Energi Kompleks Senyawa Be- Porfirin Menggunakan Metode Komputasi Semiempiris ZINDO/1. *EINSTEIN e-JOURNAL*. 2017;5(1).
- Yusuf, M., & Nasution, A. K. (2022). *An ab initio study of the reaction mechanism of 2- methylbenzaldehyde acetalization with methanol*. 14(2), 105–110.
- Yusuf, M., Octaviani, P., & Rafsanjani, M. B. (2023). Studi perhitungan celah energi senyawa kompleks bis (benzoiltrifluoroaseton) zirkonium dengan menggunakan metode semi-empiris pm3. *Einstein E-Journal*, 11(1), 10-15.
- Zumira, Aisyah, et al. 'Desain Kegiatan Praktikum Pengaruh Intensitas Cahaya terhadap Laju Proses Fotosintesis Bermuatan Literasi Kuantitatif.' *Jurnal Basicedu*, vol. 6, no. 4, 2022, pp. 7474- 7485.