

**PENELITIAN ASLI****PERHITUNGAN CELAH ENERGI DAN ANALISIS UV SENYAWA KOMPLEKS BIS (DIBENZOILMETANA)<sub>2</sub>FE MENGGUNAKAN METODE SEMI EMPIRIS PM3**

**Innayah Wulandari<sup>1</sup>, Muhammad Yusuf<sup>1\*</sup>, Afrilita Harahap<sup>1</sup>, Sasi Kirana<sup>1</sup>, Dika Fahreza<sup>1</sup>, Dedek Febriani<sup>1</sup>, Ega Amalia Yuniar<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Medan*

<b>Info Artikel</b>	<b>Abstrak</b>
Riwayat Artikel	Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis celah energi dan spektroskopi UV-Vis dari ligan dibenzoilmetana dan kompleks BIS(Dibenzoilmetana) <sub>2</sub> Fe menggunakan metode semi empiris PM3. Pada komputasi kimia digunakan software Hyperchem mode PM3 dengan basis set 32767 untuk mengoptimalkan struktur geometrianya sehingga data deskriptor HOMO dan LUMO diperoleh secara optimal. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa kompleks ini memiliki struktur geometri yang stabil sesuai dengan data eksperimental. Terkonjugasinya Fe sebagai atom pusat pada kompleks BIS(Dibenzoilmetana) <sub>2</sub> Fe mempengaruhi perhitungan celah energi menjadi 8,0434552 eV yang sebelumnya 8,4493405 eV. Analisis atom Fe pada molekul kompleks menunjukkan kontribusi signifikan dari orbital d pada atom Fe. Hal ini akan mempengaruhi kepekaan cahaya dari kompleks tersebut sehingga panjang gelombang pada kompleks BIS(Dibenzoilmetana) <sub>2</sub> Fe dan ligan dibenzoilmetana akan berbeda. Sehingga studi komputasi ini dapat menjelaskan tentang karakteristik elektronik dan spektroskopi dari kompleks BIS(Dibenzoilmetana) <sub>2</sub> Fe dan ligan dibenzoilmetana yang selanjutnya dapat digunakan sebagai dasar penelitian di laboratorium dan dapat merancang kompleks dengan logam transisi baru yang diaplikasikan potensial dalam katalisis dan material fungsional.
Diterima: 16 Sep 2024	
Direvisi: 17 Des 2024	
Diterima: 17 Feb 2025	
Diterbitkan: 17 Feb 2025	
<b>Kata kunci:</b> <i>BIS (Dibenzoilmetana)<sub>2</sub>Fe; Celah Energi; Spektroskopi UV-Vis; Panjang gelombang</i>	
<b>Corresponding Author;</b> <b>Muhammad Yusuf</b> Email: <a href="mailto:myusuf@unimed.ac.id">myusuf@unimed.ac.id</a>	

---

Jurnal Kimia Saintek dan Pendidikan

E.ISSN: 2615-3378

Vol. 8 No. 2 Desember 2024 (Hal 112-118)

Homepage: <https://e-journal.sari-mutiara.ac.id/index.php/KIMIA>

DOI: <https://doi.org/10.51544/kimia.v8i2.5317>

**How to cite:** I. Wulandari *et al.*, "Perhitungan Celah Energi Dan Analisis Uv Senyawa Kompleks BIS (Dibenzoilmetana)2FE Menggunakan Metode Semi Empiris PM3," *J. Kim. Saintek dan Pendidik.*, vol. 8, no. 2, pp. 116–123, 2025, doi: <https://doi.org/10.51544/kimia.v8i2.5317>.



## 1. Pendahuluan

Beberapa dekade terakhir perkembangan dunia teknologi berjalan begitu pesat, salah satu bentuk inovasi yang lahir akibat perkembangan ini adalah penggunaan komputer di bidang kimia yang selanjutnya dikenal sebagai kimia komputasi. Kimia komputasi merupakan cabang ilmu kimia yang mempelajari dan menghitung kajian kestabilan konformasi struktur senyawa kimia, optimasi geometri, spektroskopi molekuler, mekanisme reaksi, potensial elektrostatik, dan muatan mulliken atom (Yusuf, 2019).

Saat ini kimia komputasi merupakan disiplin ilmu yang dipelajari bagi setiap mahasiswa/i kimia karena berkorelasi antara ilmu kimia dengan eksperimen komputer yang berdasarkan kepada teori-teori algoritma (*Computer experiment*). Eksperimen komputer dibuat dengan memberikan gambaran molekul pada setiap tahapan reaksi menggunakan pendekatan teori mekanika klasik maupun mekanika kuantum (Pranowo, 2000). Kedua teori ini memiliki keunggulan masing-masing bergantung pada ukuran molekul yang akan dihitung, sehingga kimia komputasi dapat diartikan sebagai ilmu yang menerapkan kajian kimia teori kemudian diterjemahkan oleh komputer dalam bentuk *software* untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya.

Arifani, dkk., 2021 menyatakan bahwa ada berbagai jenis *software* yang digunakan dalam kimia komputasi seperti Hyperchem, Chemlab, NwChem, Gaussian, ACD/ChemSketch, dan lain-lain. Dalam praktiknya Hyperchem dan Chemlab merupakan *software* yang paling sering digunakan karena memiliki fitur lengkap, kemudahan saat digunakan, tidak menggunakan internet, dan bisa dipasang secara lokal, berbeda dengan NwChem, dan Gaussian yang terbilang sulit untuk digunakan serta ACD/ChemSketch yang hanya bisa memvisualisasikan struktur dan tidak bisa untuk menghitung sistem kimia.

*Software* Hyperchem dapat menghitung spektrum energi elektron dengan simulasi gambar 3D setelah molekul dilakukan optimasi dengan menggunakan metode semi empiris PM3 yang diketahui berdasarkan energi ikatan dan panjang ikatannya (Bai, et al., 2021). Sebagaimana telah dilaporkan oleh tim riset sebelumnya bahwa perhitungan senyawa kompleks BIS(Dibenzoilmetanato)<sub>2</sub>Zr menggunakan metode semi empiris memperoleh nilai celah energi dari hasil selisih energi HOMO (*highest occupied molecular orbital*) dengan energi LUMO (*lowest unoccupied molecular orbital*) (Tembusai, dkk., 2023) disisi lain (Kurniawan, dkk., 2023) juga melakukan riset dengan menghitung kemudahan suatu senyawa untuk tereksitasi pada kompleks BIS(trifluoroasetilasetonato)Zr.

Diketahui bahwa hasil perhitungan ini dapat dimanfaatkan sebagai dasar acuan untuk melakukan riset di laboratorium. Perhitungan energi HOMO dan LUMO pada senyawa BIS( $\beta$ -diketonato)zirconium(IV) digunakan pada polimerisasi pembukaan cincin  $\epsilon$ -kaprolakton dan  $\delta$ -valerolakton serta membuat mekanisme reaksi dari tahapan substrat menjadi produk hasil maupun produk antara (Yusuf, dkk., 2023). Hal inilah yang menjadikan peneliti untuk melakukan studi perhitungan komputasi sebagai tahapan awal riset pada berbagai jenis senyawa.

Oleh karena itu tim riset ini akan melakukan studi perhitungan pada senyawa

kompleks BIS(Dibenzoilmetana)<sub>2</sub>Fe dengan mempertimbangkan hasil yang diperoleh dengan ligan Dibenzoilmetana bertujuan untuk mengetahui nilai celah energi dan analisis spektra UV dari data yang diperoleh menggunakan metode semi empiris PM3 sehingga peneliti mampu menjelaskan sifat senyawa kompleks tersebut yang diharapkan akan berkorelasi secara signifikan dengan eksperimen di laboratorium. Selain itu hasil riset ini dapat dijadikan sebagai bahan pertimbangan peneliti untuk menggunakan kompleks pada penelitian yang akan dilakukan.

## 2. Metode

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Komputer, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Medan. Ada dua perangkat yang digunakan yaitu jenis perangkat keras (*hardware*) dan perangkat lunak (*software*). Perhitungan dilakukan menggunakan *hardware* berupa komputer *random access memory* 4,00 GB, sistem tipe 64 bit *operating system* dan sistem operasi Windows 10 dan *software* yang digunakan adalah Hyperchem 8.0. Perhitungan komputasi molekul meliputi visualisasi molekul, optimasi geometri, perhitungan celah energi (*band gap*) dan analisis spektra UV.

### Optimasi Geometri

Tahap pertama yaitu pemodelan ligan dbzm dan senyawa kompleks bis(dbzm)<sub>2</sub>Fe menggunakan *HyperChem* dengan visualisasi molekul secara 2D. Kemudian, molekul dikonversi menjadi bentuk 3D, lalu dioptimasi menggunakan *invoke model builder* yang terdapat di menu sampai diperoleh stabilitas energi maksimal pada keadaan stabil *maximum cycles* 32767 pada molekul tersebut. Dengan demikian diperoleh konfigurasi molekul yang benar dan tepat. Struktur yang telah stabil disimpan dengan format file.Hyperchem.(HIN). Selanjutnya, dihitung optimasi geometri dari senyawa tersebut dengan metode semi-empiris PM3 (Yusuf & Nasution, 2022).

### Penentuan Celah Energi

Saat konformasi stabil telah tercapai, selanjutnya dihitung celah energinya melalui data deskriptor HOMO (*highest unoccupied molecular orbital*) dan LUMO (*lowest unoccupied molecular orbital*). Celah energi merupakan selisih energi antara E.LUMO dengan E.HOMO (Saputra dan Sanjaya, 2014). Data ini diperoleh dengan cara mengklik menu *compute*, kemudian *orbitals*, lalu disesuaikan terhadap standar pencarian menjadi 0. Setelah itu, dipilih *labels* dan *plot*. Maka diperoleh nilai LUMO dan HOMO untuk dilakukan perhitungan celah energi yang selanjutnya dikenal sebagai *band gap* (Siregar dan Sinaga, 2017).

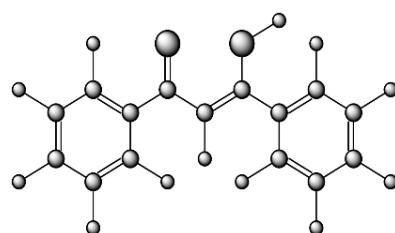
### Analisa Spektra UV (Transisi Elektronik)

Perhitungan analisis spektra UV juga dilakukan setelah senyawa mencapai konformasi stabil. Langkah pertama yang dilakukan dengan mengklik menu *compute*, lalu *single point*. Kemudian dipilih *single point CI* dengan metode *single excited*. Spektrum elektronik akan diperoleh setelah perhitungan dijalankan (Yusuf dkk, 2023). Dari dasar molekul tersebut yang digunakan pada penelitian ini untuk memperoleh nilai HOMO dan LUMO pada ligan dbzm dan senyawa kompleks bis(dbzm)<sub>2</sub>Fe sehingga akan diperoleh nilai celah energi serta analisis transisi UV kompleks.

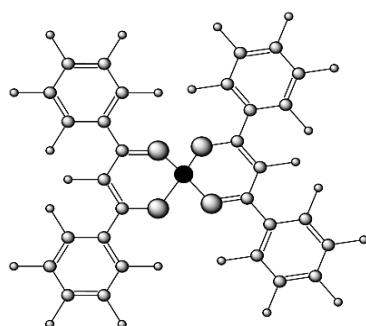
### 3. Hasil

#### Proses Komputasi Optimasi Geometri

Langkah awal yang dilakukan adalah optimasi geometri menggunakan *Hyperchem*. Hal ini bertujuan untuk mendapatkan bentuk pada konformasi paling stabil dengan meminimalisasi struktur seperti yang ditunjukkan pada Gambar 1 dan 2 dari ligan dbzm dan kompleks bis(dbzm)<sub>2</sub>Fe. Sebelum dilakukan optimasi geometri, terlebih dahulu *setting* mode semi empiris PM3. Mode semi empiris PM3 menunjukkan nilai PRESS terbaik hasil perhitungan melalui pendekatan jumlah kuadrat dari selisih eksperimental dan prediksi (Paramita dkk., 2020).



Gambar 1. Ligan Dbzm



Gambar 2. Kompleks BIS(Dibenzoilmetana)<sub>2</sub>Fe

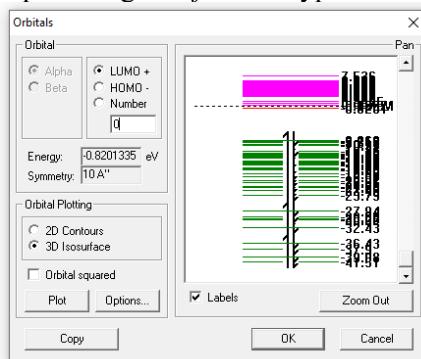
#### Analisis Celah Energi (*Band Gap*) Ligan dbzm dan Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe

Data dekriptor elektronik dari ligan dbzm dan kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe berupa nilai HOMO dan LUMO sebagai kajian awal menghitung nilai celah energi. Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, diperoleh data pada Tabel 1 berikut:

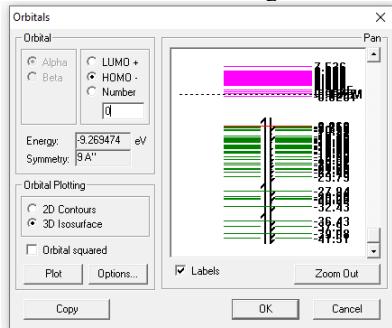
Tabel 1. Energi Ligan dbzm dan Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe

Senyawa	E. LUMO	E. HOMO	Celah Energi (eV)
dbzm	-0,8201335	-9,269474	8,4493405
BIS(Dbzm) <sub>2</sub> Fe	-0,9433638	-8,986819	8,0434552

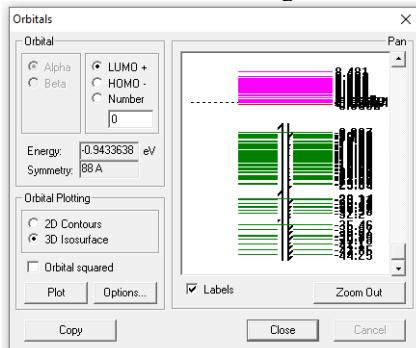
Data tabel di atas diperoleh dari perhitungan *software* Hyperchem pada Gambar 3-6 berikut :



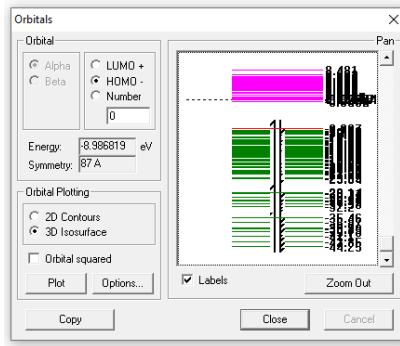
Gambar 3. LUMO ligan dbzm



Gambar 4. HOMO Ligan Dbzm



Gambar 5. LUMO Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe



Gambar 6. HOMO Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe

Data deskriptor HOMO dan LUMO yang diperoleh, dapat dihitung nilai celah energi pada ligand dbzm dan kompleks bis(dbzm)<sub>2</sub>Fe. Celah energi dideskripsikan sebagai selisih antara energi LUMO dan HOMO. Secara sistematis dituliskan sebagai berikut (Yusuf, 2023).

$$E.\text{gap} = E.\text{LUMO} - E.\text{HOMO}.$$

Rendahnya nilai celah energi menunjukkan kemudahan suatu molekul untuk berpindah. Peristiwa ini disebut sebagai eksitasi yang terjadi dalam keadaan elektronik yang lebih tinggi dari sebelumnya. Maka dapat diartikan bahwa nilai celah energi yang rendah menggambarkan kemudahan suatu molekul untuk tereksitasi dan sebaliknya jika nilai celah energi tinggi akan lebih sulit untuk mengalami eksitasi (Agustina dan kasmui, 2021).

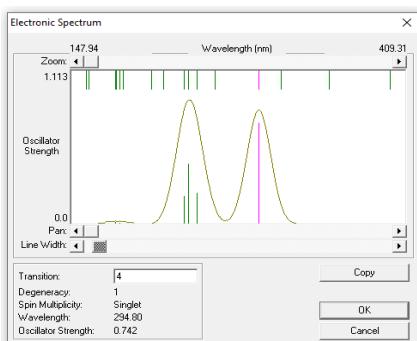
Dari hasil perhitungan celah energi, dapat dilihat bahwa kompleks bis(dbzm)<sub>2</sub>Fe memiliki nilai celah energi yang lebih kecil daripada ligan dbzm. Perbedaan nilai ini disebabkan terkonjugasinya atom pusat Fe yang berikatan dengan 2 ligan dbzm. Hal ini menyebabkan turunnya nilai celah energi menjadi 8,0434552 eV yang pada awalnya 8,4493405 eV. Menurunnya nilai celah energi tersebut berkaitan dengan penyempitan jarak antara pita valensi dengan pita konduksi. Pita valensi menunjukkan tumpukan orbital HOMO sedangkan pita konduksi menunjukkan tumpukan orbital LUMO (Sanjaya dan Saputra, 2014). Akibat rendahnya nilai celah energi menyebabkan elektron pada kompleks bis(dbzm)<sub>2</sub>Fe lebih mudah berpindah yang menjadikannya memiliki kesensitifan (kepekaan) lebih tinggi terhadap cahaya dibandingkan ligan dbzm yang diperjelas dengan struktur pita energi (Gambar 3-6) dari hasil komputasi HOMO dan LUMO.

### Spektra UV Senyawa Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe

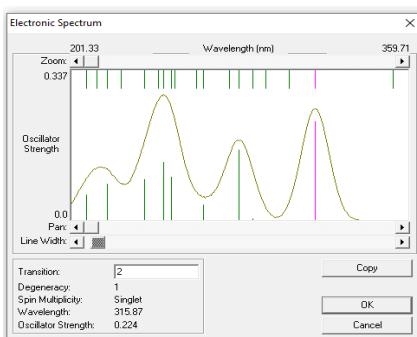
Tabel 2. Spektra UV Ligan dbzm dan Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe

Senyawa	Maksimum
dbzm	294,80 nm
BIS(Dbzm) <sub>2</sub> Fe	315,87 nm

Data tabel di atas diperoleh dari perhitungan software Hyperhem pada Gambar 7-8 berikut:



Gambar 7. Spektra UV Ligan Dbzm



Gambar 8. Spektra UV Kompleks BIS(Dbzm)<sub>2</sub>Fe

Dari hasil spektra UV pada ligan dbzm dan kompleks bis(dbzm)2Fe, dapat dilihat bahwa kompleks bis(dbzm)2Fe memiliki panjang gelombang lebih tinggi daripada ligan dbzm. Peristiwa ini menandakan bahwa keberadaan atom pusat Fe pada kompleks menyebabkan terjadinya peningkatan panjang gelombang maksimum akibat adanya penyerapan cahaya yang lebih baik. Berdasarkan penelitian yang telah dilaporkan oleh Yusuf (2023), panjang gelombang maksimum berbanding terbalik dengan celah energi.

Data spektra UV yang diperoleh sejalan dengan persamaan energi foton yang menyatakan bahwa besarnya energi berbanding terbalik dengan panjang gelombang maksimum. Secara matematis, persamaan tersebut dituliskan sebagai berikut (Yusuf dkk, 2023).

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

dengan: E = energi, c = kecepatan cahaya, h = tetapan planck,  $\lambda$  = Panjang gelombang.

#### 4. Simpulan

Dari penelitian ini, diperoleh celah energi pada kompleks bis(dbzm)2Fe 8,0434552 eV dan ligan dbzm 8,4493405eV. Nilai celah energi yang lebih kecil akan mempengaruhi kemudahan senyawa tersebut tereksifikasi. Hal ini juga akan mempengaruhi panjang gelombang pada kompleks sebesar 315,87 nm dan ligan sebesar 294,80 nm.

#### 5. Ucapan Terima Kasih

Kami berterima kasih kepada pihak LPPM atas dana hibah penelitian No. 00299/UN33/KPT/2024. Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada Kemendikbudristek RI untuk penelitian ini, yang berasal dari Dana DIPA DRTPM Ditjen Dikristek, No. SPA DIPA-023.17.1.690523/2024.

#### 6. Daftar Pustaka

1. Agustina, L., & Kasmui, K. (2021). Studi Komputasi Aktivitas Senyawa Turunan Santon Sebagai Antikanker Leukemia Myeloid Kronik K562. *Indonesian Journal of Mathematics and Natural Sciences*, 44(1), 1-11.
2. Arifani, D. Y. M., Savalas, L. R. T., Ananto, A. D., Junaidi, E., & Hadisaputra, S. (2021). Pengembangan Modul Praktikum Kimia Berbasis Kimia Komputasi Pada Materi Asam Basa. *Prosiding SAINTEK*, 3, 660-666.
3. Bai, W., Tao, M., Zhang, X., & Dong, J. (2021, November). Research on the composition of UV curing modified compounds for 3D printing based on HyperChem simulation. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 2076, No. 1, p. 012052). IOP Publishing.
4. Kurniawan, B., Yusuf, M., Reka, L. A., & Rafsanzani, M. B. (2023). Kajian Komputasi Perhitungan Celah Energi Dan Analisis Uv Senyawa Kompleks Bis (Trifluoroacetylacetone) 2zr Menggunakan Metode Semi Empiris Pm3. *Cheds: Journal Of Chemistry, Education, And Science*, 7(2), 129-136.
5. Paramita, S., YD, E. V., Nasrokhah, N., & Iswanto, P. (2020). Pemilihan Metode Perhitungan Kimia Komputasi Semi-Empiris Untuk Pengembangan 1, 3, 4-Thiadiazole. *Indonesian Journal of Chemical Research*, 8(1), 51-56.
6. Pranowo, H.D. 2000. Kimia Komputasi. Universitas Gadjah Mada. Yogyakarta.
7. Saputra A.S., & Sanjaya, I Gusti Made. 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.
- 8. Siregar, A.M. & Sinaga, H.J. 2017. Studi Penentuan Semikonduktor Melalui Kajian Celah Energi Kompleks Senyawa Be-Porfirin Menggunakan Metode Komputasi Semiempiris ZINDO/1. EINSTEIN e- JOURNAL 5.
  - 9. Tembusai, T. H., Yusuf, M., Rafsanzani, M. B., Octaviani, P., Wulandari, I., & Reka, L. A. (2023). Studi Perhitungan Celah Energi Senyawa Kompleks Bis (Dibenzoilmetanato) Zirkonium Menggunakan Metode Semi-Empiris Pm3. *Jurnal Kimia Saintek Dan Pendidikan*, 7(2), 75-80.
  - 10. Yusuf, M. & Nasution, A. K. 2022. An ab initio study of the reaction mechanism of 2- methylbenzaldehyde acetalization with methanol. *J. Pendidik. Kim.* 14, 105–110.
  - 11. Yusuf, M., Nurfajriani, Siregar, R., Eddiyanto, & Nugraha, A. W. (2023). Determination of HOMO and LUMO of bis ( $\beta$ -diketonate) zirconium (IV) compound used as a catalyst in the ring opening polymerization of  $\epsilon$ -Caprolactone and  $\delta$ -Valerolactone. *Journal of Macromolecular Science, Part A*, 60(12), 865-874.
  - 12. Yusuf, M. (2019). Pemodelan Molekul Menggunakan Software Hyperchem & Avogadro. Harapan Cerdas. Medan.
  - 13. Yusuf, M. 2023. Theoretical study to determine the band gap of the bis (benzoylacetone)zirconium complex compound using the PM3 semi-empirical computational method. *Jurnal Pendidikan Kimia (JPKIM)*. 15(1), 23-28.