

## PEMODELAN STRUKTUR KOMPLEKS TEMBAGA(II)- FENANTROLIN MENGGUNAKAN SOFTWARE GAMESS

### *Modelling The Complex Structure Of Copper(II)- Phenanthroline Using Gamess Software*

**Leo Saputra\*, Neysa Syafira, Tika Eka Citra, Halida Sophia**

Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Riau,  
Pekanbaru 28293, Indonesia

\*email: leo.saputra@lecturer.unri.ac.id

**Abstrak.** Perhitungan komputasi berbasis *website* yang tidak berbayar dan dapat diakses oleh siapapun akan berperan sangat penting dalam pembelajaran kimia komputasi bagi pemula. Pada penelitian ini, kami telah melakukan optimasi struktur kompleks Cu(II)-fenantrolin (Cu(II)-phe2) menggunakan perangkat lunak GAMESS pada kluster komputer San Diego Supercomputing Center (SDSC) melalui [www.chemcompute.org](http://www.chemcompute.org). Hasil perhitungan komputasi menunjukkan bahwa kedua ligand fenantrolin tidak berada pada satu bidang datar, tetapi membentuk sudut 35,4°.

**Kata kunci:** Cu(II)-fenantrolin, DFT, GAMESS, [chemcompute.org](http://chemcompute.org)

**Abstract.** A free-access web-based computational package will be very helpful for learning the computational chemistry for beginner. In this study, the complex structure of copper(II)-phenanthroline ligands (Cu(II)-phe2) has been optimized using the GAMESS software at the computer cluster of San Diego Supercomputing Center (SDSC) via [www.chemcompute.org](http://www.chemcompute.org). The calculation of Cu(II)-phe2 complex structure was carried out by using the DFT method and 6-31G(d) basis set. The calculation results showed that the two phenanthroline ligands were not on one flat plane but instead forming an angle of 35.4°.

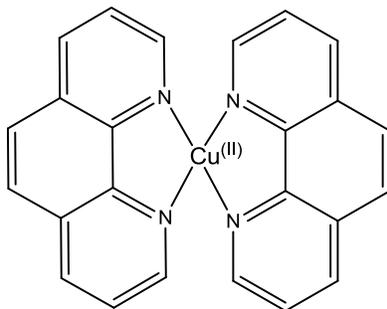
**Keywords:** Cu(II)-phenanthroline, DFT, GAMESS, [chemcompute.org](http://chemcompute.org)

## PENDAHULUAN

Penelitian kimia pada umumnya menggunakan bahan kimia yang harganya relatif mahal dan sulit diperoleh. Bahan kimia tersebut terkadang sangat berbahaya jika terhirup atau tertelan. Selain itu, setelah eksperimen selesai akan menghasilkan limbah kimia yang juga berbahaya jika tidak ditangani dengan benar (Setiawati dkk, 2019). Sebagaimana kita ketahui, untuk membeli suatu bahan kimia tertentu kadang memerlukan waktu hingga berbulan-bulan karena harus mengimpor dari luar negeri. Peralatan dan instrumen karakterisasi yang digunakan juga ketersediannya sangat terbatas dan harganya sangat mahal, sehingga tidak memungkinkan diakses oleh setiap orang. Sebagai contoh, instrumen *X-Ray Diffractometer* (XRD), *Nuclear Magnetic Resonance* (NMR), dan *Scanning Electron Microscopy* (SEM) hanya dimiliki oleh

beberapa lembaga dan perguruan tinggi di Indonesia. Selain itu, selama pandemi Covid-19 ini juga sangat dianjurkan untuk melakukan kegiatan penelitian di rumah masing-masing dibandingkan di laboratorium bersama (Radjasa & Priyoningsih, 2020).

Kimia komputasi memberikan harapan baru untuk mengatasi permasalahan di atas. Seiring meningkatnya kemampuan komputer, perhitungan komputasi berbasis kimia kuantum untuk sistem yang lebih rumit dari atom hidrogen semakin memungkinkan untuk dilakukan. Saat ini telah tersedia berbagai perangkat lunak untuk perhitungan komputasi seperti Gaussian (<https://gaussian.com/>), NWChem (<https://www.nwchem-sw.org/>), Quantum Espresso (<https://www.quantum-espresso.org/>), dan GAMESS (<https://www.msg.chem.iastate.edu/>). Perhitungan molekul sederhana pada dasarnya dapat dilakukan menggunakan komputer pribadi, tetapi untuk sistem yang besar seperti kompleks logam akan memakan waktu yang sangat lama. Sehingga, diperlukan akses ke suatu kluster atau superkomputer yang kemampuannya lebih tinggi. Namun, akses ke superkomputer tersebut sangat terbatas dan memerlukan pengetahuan perintah terminal Linux. Hal ini tentu tidak mudah untuk pemula dalam kimia komputasi. Oleh karena itu, perhitungan komputasi menggunakan perangkat yang gratis serta dengan *graphical user interface* (GUI) yang mudah dipahami akan sangat membantu pembelajaran kimia komputasi.



**Gambar 1.** Struktur 2D kompleks logam tembaga(II)-fenantrolin (Cu(II)-phe2)

Pada penelitian ini, kami menggunakan perangkat kimia komputasi yang tidak berbayar yaitu GAMESS (*The General Atomic and Molecular Electronic Structure System*) yang dapat diakses melalui laman [chemcompute.org](http://chemcompute.org) (Perri & Weber, 2014). Perhitungan komputasi ini dilakukan pada kluster komputer *San Diego Supercomputing Center* (SDSC), Amerika Serikat melalui laman [chemcompute.org](http://chemcompute.org) (Towns dkk, 2014). Pengguna hanya perlu melakukan registrasi pada laman tersebut dan dapat langsung mengakses superkomputer. Kami melakukan optimasi struktur kompleks logam tembaga(II)-fenantrolin (Cu(II)-phe2) sebagai model (**Gambar 1**) (Chen dkk, 2011). Pada gambar 2D tersebut, kedua ligan fenantrolin terletak pada bidang yang sama. Struktur 3D sangat diperlukan untuk mengetahui struktur kompleks yang mendekati sebenarnya. Hasil perhitungan komputasi menunjukkan bahwa bidang antara kedua ligan fenantrolin tersebut membentuk sudut  $35,4^\circ$ .

**METODE PENELITIAN**

Prosedur yang dilakukan pada penelitian ini meliputi:

- 1) Akses ke Superkomputer SDSC diperoleh setelah melakukan registrasi pada laman <https://chemcompute.org/register/>. Pengguna perlu mengisi data *username*, *email*, dan *password* kemudian klik tombol SIGN ME UP. Email konfirmasi akan otomatis dikirim pada alamat email yang kita masukkan. Input perhitungan komputasi dapat dibuat secara manual melalui *software* Avogadro (<https://avogadro.cc/>) atau secara otomatis laman <https://chemcompute.org/gamess/submit>. Struktur kompleks Cu(II)-phe2 juga dapat diperoleh dengan memasukkan koordinat kartesiusnya sebagaimana ditampilkan pada Tabel 1.

**Tabel 1. Koordinat kartesius pada input molekul Cu(II)-phe2**

Atom	Nomor Atom	Sumbu		
		X	Y	Z
N	7.0	3.37793	4.70753	-0.39299
C	6.0	3.36409	5.96175	-0.85135
C	6.0	2.17285	6.62793	-1.18209
C	6.0	0.96418	5.97046	-1.03541
C	6.0	0.94751	4.63076	-0.57899
C	6.0	2.19425	4.04278	-0.26975
C	6.0	-0.24527	3.84661	-0.42041
C	6.0	-0.18234	2.54949	0.00242
C	6.0	1.07645	1.92968	0.31458
C	6.0	2.26199	2.68609	0.18073
C	6.0	1.21403	0.59148	0.75373
C	6.0	2.47142	0.09665	1.05213
C	6.0	3.59479	0.92849	0.90502
N	7.0	3.50220	2.18947	0.47139
Cu	29.0	4.90296	3.56645	0.16275
N	7.0	6.16966	4.98844	0.67693
C	6.0	7.43346	4.69169	0.25977
C	6.0	8.50865	5.60313	0.35893
C	6.0	8.22948	6.86423	0.93747
C	6.0	6.95408	7.13728	1.40238
C	6.0	5.94322	6.17301	1.25143
C	6.0	7.64194	3.38128	-0.27688
C	6.0	8.93210	2.99348	-0.70084
C	6.0	10.00552	3.94712	-0.62188
C	6.0	9.80178	5.20116	-0.12045
N	7.0	6.55152	2.55959	-0.35048
C	6.0	6.72315	1.32062	-0.81958
C	6.0	7.97630	0.83589	-1.23197
C	6.0	9.07930	1.67014	-1.18078
H	1.0	4.32433	6.45514	-0.95809
H	1.0	2.21867	7.64967	-1.54374
H	1.0	0.03036	6.47235	-1.27420
H	1.0	-1.20282	4.30490	-0.65001
H	1.0	-1.09062	1.96442	0.11246
H	1.0	0.33296	-0.03653	0.85678

H	1.0	2.60576	-0.92317	1.39742
H	1.0	4.58825	0.56579	1.14945
H	1.0	9.01887	7.60701	1.02234
H	1.0	6.71774	8.08589	1.87258
H	1.0	4.93147	6.36389	1.59610
H	1.0	10.98983	3.65072	-0.97218
H	1.0	10.62079	5.91323	-0.06888
H	1.0	5.84134	0.69064	-0.87703
H	1.0	8.05995	-0.18518	-1.58954
H	1.0	10.05525	1.31789	-1.50389

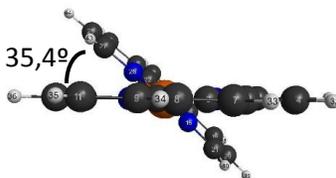
- 2) Pada penelitian ini, kami mencoba melakukan optimasi struktur senyawa kompleks tembaga(II) dengan dua ligan 1,10-fenantrolin (Cu(II)-phe2) (**Gambar 1**). Kompleks ini bermuatan +2 dan dengan nilai multiplisitas 2. Multiplisitas ( $n$ ) dapat dihitung dengan rumus  $n=S+1$ , dimana  $S$  merupakan jumlah elektron yang tidak berpasangan.
- 3) Kami menggunakan metode *density functional theory* (DFT) dengan tipe B3LYP (Becke, 3 parameter, Lee-Yang-Par), dan basis set 6-31G(d) (Lee dkk, 1988; Becke, 1988). Pada basis set ini terdapat fungsi polarisasi pada orbital d. Mengingat terdapat logam transisi Cu dan terdapat 46 atom lainnya, maka diperkirakan perhitungan komputasi akan memakan waktu yang cukup lama, sehingga kami memilih kluster Comet pada SDSC. Kluster ini dapat menyediakan 24-core *processor* dan waktu perhitungan maksimal selama 48 jam.
- 4) Output perhitungan komputasi akan secara otomatis ditampilkan pada <https://chemcompute.org/gamess/status/>. Secara manual, file output juga dapat didownload dan dibuka menggunakan Notepad++ atau Avogadro

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Struktur kompleks Cu(II)-phe2 hasil perhitungan komputasi dapat dilihat pada Gambar 2 dan Gambar 3. Pada gambar tersebut terlihat jelas bahwa semua atom pada ligan 1,10-fenantrolin terletak pada satu bidang datar. Menariknya, ligan fenantrolin lainnya ternyata tidak berada pada bidang yang sama, tetapi membentuk sudut sempit yaitu  $35,4^\circ$  (Gambar 3). Sudut ini lebih stabil dibanding jika kedua ligan tersebut berada pada satu bidang karena gaya tolak-menolak antar atom lebih kecil, terutama antara atom H30 dengan H40 serta atom H37 dengan H43.



**Gambar 2. Struktur 3D kompleks Cu(II)-phe2 tampak atas. Atom berwarna oranye= Cu, biru= N, hitam= C, putih= H**

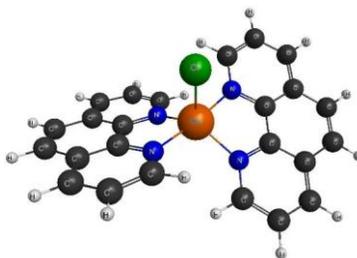


**Gambar 3. Struktur 3D kompleks Cu(II)-phe2 tampak samping. Atom berwarna oranye= Cu, biru= N, hitam= C, putih= H.**

Atom nitrogen (N) pada ligan fenantrolin memiliki 1 pasang elektron tidak berpasangan yang dapat digunakan untuk berikatan dengan atom pusat Cu(II). Ligan ini dikenal juga sebagai ligan bidentat karena memiliki 2 atom N yang dapat digunakan untuk berikatan dengan atom pusat. Atom pusat Cu(II) memiliki konfigurasi elektron  $[\text{Ar}]3d^94s^0$ , sehingga akan memiliki 1 elektron tidak berpasangan dan bersifat paramagnetik. Kompleks logam bermuatan positif ini biasanya memiliki *counter anion* seperti  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ , dan sebagainya (Gambar 3). Berbeda dengan struktur segiempat planar yang sudutnya tepat  $90^\circ$ , sudut pada kompleks Cu(II)-phe2 mengalami distorsi sebagaimana ditampilkan pada Tabel 2.

**Tabel 2. Representasi panjang dan sudut ikatan pada kompleks Cu(II)-phe2**

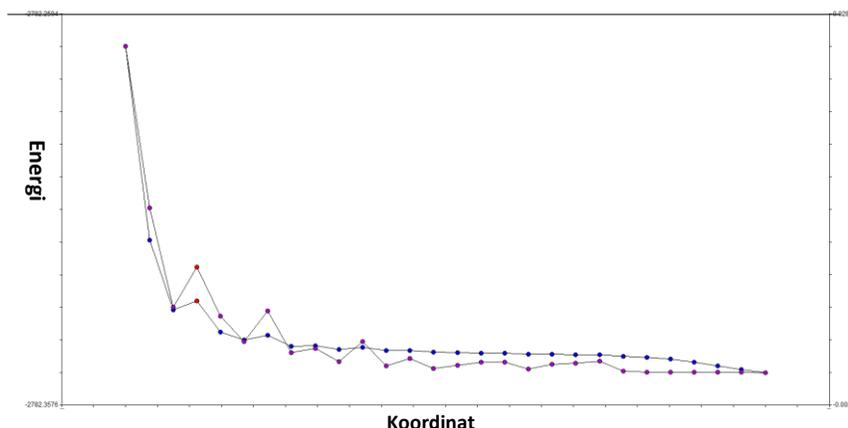
Atom	Panjang Ikatan (Å)	Atom	Sudut Ikatan ( $^\circ$ )
1-15	1,984	1-15-16	98,7
14-15	1,988	14-15-26	105,8
15-16	1,973	1-15-14	84,3
15-26	1,998	16-15-26	84,3



**Gambar 4. Struktur 3D kompleks Cu(II)Cl-phe2. Atom berwarna hijau= Cl.**

Energi relatif dari input awal ( $-2782,2675$  Hartree) hingga selesai perhitungan komputasi ( $-2782,3494$  Hartree) ditampilkan pada Gambar 5. Pada gambar tersebut, energi cenderung menurun seiring semakin mendekatinya ke struktur yang paling stabil.

Pada struktur paling stabil ini, energi tolakan antar atomnya adalah paling minimum. Waktu yang diperlukan hingga energinya konvergen adalah sekitar 24 jam.



Gambar 5. Plot koordinat kompleks Cu(II)-phe2 terhadap energi relatifnya.

## SIMPULAN

Otimasi struktur kompleks Cu(II)-phe2 menggunakan optimasi struktur kompleks Cu(II)-phe2 menggunakan bahwa kedua ligan fenantrolin pada kompleks tersebut tidak berada pada satu bidang datar, tetapi membentuk sudut  $35,4^\circ$ . Penulis menyarankan untuk dilakukan perhitungan parameter IR, UV-Vis, dan NMR pada penelitian selanjutnya. Penelitian ini didanai oleh DIPA FMIPA Universitas Riau dengan No. Kontrak 2406b/UN19.5.1.1.3/PL.01.00/2020.

## DAFTAR RUJUKAN

- Becke, A. D. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review A*, 38(6), 3098–3100.
- Chen, G. H., Wang, B. X., Yin, Z. G. (2011). Preparation of 1,10-phenanthroline-copper(II) micro- and nanorods and its influencing factors, *Journal of Synthetic Crystals*, 40(1), 210–206.
- Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37(2), 785–789.
- Perri, M. J., & Weber, S. H. (2014). Web-based job submission interface for the GAMESS computational chemistry program. *Journal of Chemical Education*, 91(12), 2206–2208.
- Radjasa, O. K., & Priyoningsih, Y. (2020). Panduan penyelenggaraan pembelajaran semester gasal 2020/2021 di perguruan tinggi. *Direktorat Pembelajaran dan Kemahasiswaan, Kementerian Pendidikan dan Kebudayaan RI*, Edisi II, 23 Juli 2020. <https://dikti.kemdikbud.go.id/>

- Setiawati, T. A., Wulandari, E., Komarudin, Desniati, E. (2019). Sistem dokumentasi pengelolaan limbah cair beracun dan berbahaya (B3) di laboratorium jasa uji. *Indonesian Journal of Laboratory*, 1(2),41–48.
- Towns, J., Cockerill, T., Dahan, M., Foster, I. Gaither, K., Grimshaw, A., Hazlewood, V., Lathrop, S., Lifka, D., Peterson, G. D., Roskies, R., Scott, J. R., Wilkins-Diehr, N. (2014). XSEDE: Accelerating scientific discovery. *Computing in Science & Engineering*, 16(5), 62–74.