

## **PREDIKSI STRUKTUR SENYAWA KOORDINASI DARI TEMBAGA(II) KLORIDA, KALIUM SIANIDA, DAN LIGAN *N,N'*- DIETILTIOUREA**

Dinar Rachmadika Baharintasari, Fariati dan I Wayan Dasna  
Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,  
Universitas Negeri Malang (UM)  
Jalan Semarang no. 5, Malang, 65145  
Email: f4riati@gmail.com

**Abstrak:** Berdasarkan teori asam dan basa, keras dan lunak, ion tembaga(I) dan tembaga(II) dapat berikatan koordinasi dengan atom donor N dan S seperti ligan *N,N'*-diethylthiourea (*detu*) dan ion sianida. Struktur senyawa koordinasi tersebut belum dilaporkan. Tujuan penelitian adalah memprediksi struktur senyawa koordinasi dari tembaga(II) klorida dengan kalium sianida dan ligan *detu* pada perbandingan stoikiometri sebesar 1:3:1. Data penelitian menunjukkan uji titik lebur sebesar 211-214°C, uji daya hantar listrik yaitu 99,9  $\mu\text{S}/\text{cm}$ , uji kualitatif sianida dihasilkan endapan merah, uji kualitatif klorida diamati tidak terbentuk endapan putih, serta prediksi energi bebas dihitung dengan komputasi sebesar -4267,20 kJ/mol. Prediksi struktur senyawa koordinasi dari data penelitian yang diperoleh adalah  $[\text{CuCN}(\text{detu})_3](\text{CN})$  dengan koordinasi segi-4 planar di sekitar atom pusat tembaga(II) dengan *detu* adalah ligan, sedangkan ion sianida bertindak sebagai ligan juga ion penyeimbang.

**Kata Kunci :** *detu*, ion sianida, senyawa koordinasi tembaga(II), prediksi struktur senyawa koordinasi

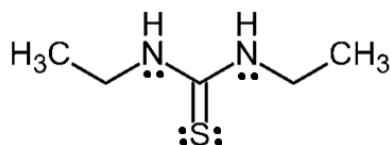
**Abstract:** Based on Hard and Soft Acids and Bases (HSAB), Cu(I) and Cu(II) ions can coordinate with N and S donor atoms such as *N,N'*-diethylthiourea (*detu*) and cyanide ions. The structure of the coordination compound has not been reported. The purpose of research was predict the coordination compound structure of Cu(II) chloride with potassium cyanide and *detu* ligand at a stoichiometric ratio of 1:3:1. The research data showed a melting point was 211-214°C, having an electrical conductivity of 99,9  $\mu\text{S}/\text{cm}$ , a cyanide qualitative test showed the red precipitate, a qualitative chloride test showed negative result, and a free energy prediction calculated by computation of -4267.20 kJ/mol. The prediction of the coordination compound structure is  $[\text{CuCN}(\text{detu})_3](\text{CN})$  with planar rectangular coordination around the central Cu(II) atom with *detu* is the ligand, whereas the cyanide ion acts as a ligand as well as a counter ion.

**Keywords :** *detu*, cyanide ion, Cu(II) coordination compound, coordination compound structures prediction

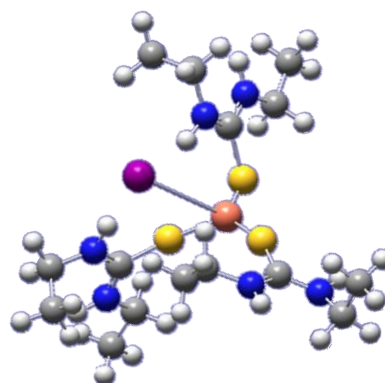
## PENDAHULUAN

Salah satu teori yang digunakan sebagai dasar pembentukan senyawa koordinasi adalah teori *Hard and Soft Acid and Bases* (HSAB). Berdasarkan teori tersebut, ion tembaga(II) adalah asam perbatasan, sedangkan atom donor S dari ligan *detu* dan atom donor C dari ion sianida merupakan basa lunak, sehingga senyawa koordinasi dari tembaga(II) dengan ion sianida dan ligan *detu* dapat disintesis.

Ion tembaga(I) dan tembaga(II) dapat menjadi atom pusat pada senyawa koordinasi dengan ligan dari unsur golongan 15 dan 16. Atom N dari golongan 15 dan S dari golongan 16 sebagai atom donor dari ligan yang digunakan yaitu *N,N'*-diethyltiourea (*detu*). Struktur *detu* ditunjukkan pada Gambar 1. Senyawa koordinasi dari ion tembaga dan turunan *tu* yang dilaporkan yaitu  $[\text{CuI}(\text{detu})_3]$  (Fun *et al.*, 1998) dengan perbandingan stoikiometri Cu:ligan:anion adalah 1:3:1 dilihat pada Gambar 2.

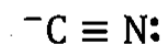


Gambar 1. Struktur *detu*



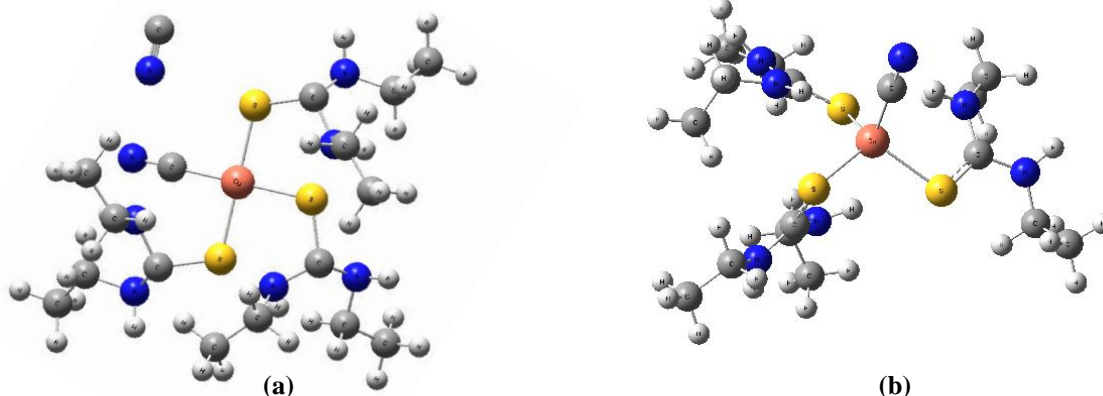
Gambar 2. Struktur  $[\text{CuI}(\text{detu})_3]$  (Fun *et al.*, 1998)

Ion tembaga juga dapat berikatan dengan ion sianida ( $\text{CN}^-$ ). Struktur ion sianida ditunjukkan pada Gambar 3. Ion sianida menjadi ion pengimbang dengan muatan 1- atau menjadi ligan karena mendonorkan pasangan elektron bebas dari atom C. Namun, senyawa koordinasi dari tembaga(II) klorida dengan kalium sianida, dan ligan *detu* dengan perbandingan stoikiometri 1:3:1 belum dilaporkan.



Gambar 3. Struktur Ion Sianida

Prediksi struktur dari perbandingan tersebut memiliki dua kemungkinan, yaitu segi-4 planar dan tetrahedral yang dilihat dari Gambar 4. Hasil perhitungan energi bebas dari struktur segi-4 planar dan tetrahedral adalah  $-4267,20$  dan  $-4240,37$  kJ/mol berturut-turut. Tujuan penelitian adalah memprediksi struktur senyawa koordinasi dari tembaga(II) klorida dengan kalium sianida dan ligan *detu* pada perbandingan stoikiometri sebesar 1:3:1.



Gambar 4. Prediksi Struktur  $[\text{CuCN}(\text{detu})_3]^+$  (a) segi-4 planar dan (b) tetrahedral

## METODE PENELITIAN

### Bahan

Bahan-bahan yang digunakan dalam penelitian yaitu garam tembaga(II) klorida, garam kalium sianida, ligan *detu*, dan pelarut metanol.

### Instrumen

Instrumen yang digunakan dalam penelitian yaitu alat ukur titik lebur (*Fisher Scientific*) dan seperangkat alat konduktometer (*Omega Engineering, INC*).

### Sintesis Tembaga(II) Klorida, *detu*, dan Ion Sianida

Sintesis senyawa kompleks dilakukan dengan metode reaksi langsung dari tembaga(II) klorida dengan kalium sianida dan ligan *detu* dalam perbandingan stoikiometri 1:3:1 yang merupakan modifikasi dari metode Fun dkk. (1998). Sintesis senyawa kompleks dilakukan dengan melarutkan tembaga(II) klorida (1 mmol; 0,1453 g) dalam 2 mL metanol (Larutan I) selama 3 menit, ligan *detu* (3 mmol; 0,4077 g) dalam 3 mL metanol (Larutan II) selama 4 menit, dan kalium sianida (2 mmol, 0,1353 g) dalam 3 mL metanol (Larutan III) selama 3 menit serta diaduk dengan pengaduk magnet,. Kemudian Larutan I ditambahkan setetes demi setetes ke dalam Larutan II dan diaduk dengan pengaduk magnet selama 1,5 jam. Larutan tersebut ditambahkan sedikit demi sedikit ke dalam Larutan III dan diaduk dengan pengaduk magnet selama 3,5 jam. Kristalisasi dilakukan dengan penguapan dalam temperatur ruang (25°C).

### Karakterisasi Senyawa Koordinasi

Senyawa koordinasi hasil sintesis dikarakterisasi dengan uji titik lebur untuk mengetahui kemurnian senyawa koordinasi, uji daya hantar listrik dan uji kualitatif ion sianida untuk mengetahui senyawa koordinasi merupakan senyawa ionik atau molekuler, dan uji kualitatif ion klorida untuk mengetahui kristal yang terbentuk bukan hasil samping reaksi.

**HASIL DAN PEMBAHASAN****Uji Titik Lebur**

Data uji titik lebur dari Merck Index dan hasil pengamatan dibaca pada Tabel 1. Titik lebur senyawa koordinasi yaitu 212-214°C dengan rentang 2-3°C dan berada diantara titik lebur reaktan dan ligan, yaitu KCN dan *detu*. Hal tersebut menunjukkan bahwa senyawa koordinasi hasil penelitian merupakan senyawa murni hasil analisis.

**Tabel 1. Data Hasil Pengamatan Uji Titik Lebur**

Senyawa	Titik Lebur (°C)	
	Merck Index 13 <sup>rd</sup> Edition	Hasil Pengamatan ( <i>Fisher Scientific</i> )
CuCl <sub>2</sub>	~100	101-102
KCN	634	-
<i>detu</i>	76-78	75-76
Senyawa koordinasi	-	212-214

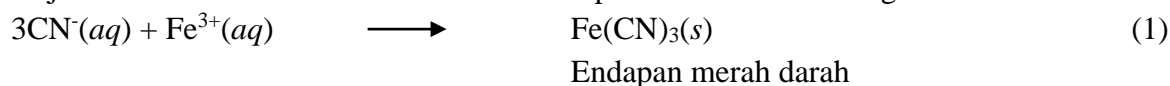
**Uji Daya Hantar Listrik (DHL) dan Uji Kualitatif Sianida**

Data DHL hasil pengamatan ditunjukkan pada Tabel 3. Nilai DHL senyawa koordinasi mendekati DHL reaktan, sehingga senyawa koordinasi hasil penelitian merupakan senyawa ionik.

**Tabel 2. Data Hasil Pengamatan Uji Daya Hantar Listrik**

Senyawa	Konsentrasi (M)	Massa (g)	Daya Hantar Listrik (μS/cm)
CuCl <sub>2</sub>	0,001	0,0014	115,6
KCN	0,001	0,006	95,7
<i>detu</i>	0,001	0,0013	3,9
Senyawa koordinasi	0,001	0,0038	99,9
Pelarut metanol	-	-	4,43

Uji kualitatif ion sianida dilakukan menurut persamaan reaksi sebagai berikut :



Endapan merah darah menunjukkan bahwa ion sianida berperan sebagai anion pengimbang. Kedua karakterisasi tersebut menyakatan bahwa senyawa koordinasi merupakan senyawa ionik dan sesuai dengan prediksi rumus molekul yaitu  $[\text{CuCN}(\text{detu})_3]^+$ .



**Gambar 5. Hasil Uji Kualitatif Ion Sianida**

### Uji Kualitatif Ion Klorida



Uji kualitatif ion klorida dilakukan menurut persamaan reaksi sebagai berikut:

Hal ini menunjukkan bahwa kristal hasil penelitian merupakan senyawa koordinasi hasil sintesis.



**Gambar 6. Hasil Uji Kualitatif Ion Klorida**

### Prediksi Struktur dan Komposisi Atom-atom

Hasil analisis prediksi struktur yang dipilih adalah segi-4 planar pada Gambar 4a, karena mempunyai energi bebas lebih rendah daripada struktur tetrahedral. Perhitungan prediksi komposisi atom-atom penyusun senyawa koordinasi ditunjukkan pada Tabel 3.

**Tabel 3. Data Hasil Perhitungan Analisis EDX**

Atom	Persentase Massa (%)	Persentase Atom (%)
Tembaga	12,71	1,54
Karbon	39,71	26,15
Nitrogen	21,80	12,31
Sulfur	18,71	4,62

Berdasarkan perhitungan secara teoritik, perbandingan persentase atom Cu:S adalah 1:3, sehingga senyawa koordinasi hasil sintesis mempunyai rumus empiris yaitu  $\text{CuC}_{17}\text{H}_{36}\text{N}_8\text{S}_3$  dan sesuai dengan prediksi rumus molekul, yaitu  $[\text{CuCN}(\text{detu})_3](\text{CN})$ .

### **KESIMPULAN**

Berdasarkan data penelitian dan pembahasan yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa karakterisasi senyawa koordinasi hasil sintesis menunjukkan kristal hasil penelitian merupakan senyawa koordinasi ionik yang baru dan murni. Prediksi struktur senyawa koordinasi adalah  $[\text{CuCN}(\text{detu})_3](\text{CN})$  dengan koordinasi segi-4 planar di sekitar atom pusat tembaga(II) dengan detu adalah ligan, sedangkan ion sianida bertindak sebagai ligan juga ion pengimbang.

### **DAFTAR RUJUKAN**

Fun, H., Razak, I. A., Pakawatchai, A. C., Khaokong, B. C., Hantrapomma, B. S., & Saithong, S. 1998. Tris(N,N'-diethylthiourea-S)iodocopper(I) and Tris(N,N'-diethylthiourea-S)iodosilver(I). *Acta Cryst*, C54: 453-456.  
Merck Index 13<sup>rd</sup> Edition.