

**PROSEDING**

**SEMINAR NASIONAL BASIC SCIENCE II**

*Tema:*

*Kontribusi Sains untuk Pengembangan Pendidikan,  
Biodiversitas dan Mitigasi Bencana pada Daerah Kepulauan*



Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Universitas Pattimura  
Ambon 2010

ISBN : 978-602-97522-0-5

# **PROSEDING**

## *SEMINAR NASIONAL BASIC SCIENCE II*

Kontribusi Sains Untuk Pengembangan Pendidikan,  
Biodiversitas dan Mitigasi Bencana  
Pada Daerah Kepulauan



### **SCIENTIFIC COMMITTEE:**

Prof. H.J. Sohilait, MS  
Prof. Dr. Th. Pentury, M.Si  
Dr. J.A. Rupilu, SU  
Drs. A. Bandjar, M.Sc  
Dr.Ir. Robert Hutagalung, M.Si

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS PATTIMURA  
AMBON, 2010**

2 Juli 2010

**STUDI KOMPUTASI PADA KONTRIBUSI EFEK MOMEN DIPOL,  
POLARISASI DAN TRANSFER MUATAN TERHADAP KEKUATAN  
IKATAN HIDROGEN  
ANTAR MOLEKUL AIR**

Yusthinus T. Male<sup>1</sup>, Abraham Mariwy<sup>2</sup><sup>1</sup>Jurusan Kimia, FMIPA Universitas Pattimura\*<sup>2</sup>Program Studi Kimia, FKIP Universitas PattimuraE-mail: [yusmale@yahoo.com](mailto:yusmale@yahoo.com)**ABSTRAK**

Telah dilakukan penelitian untuk mempelajari struktur dan energi yang mendominasi pembentukan ikatan hidrogen dalam dimer air menggunakan studi kimia kuantum ab initio. Perhitungan dilakukan menggunakan tingkat teori HF/SCF dan MP2 dengan himpunan basis 6-31G(d) dan penelitian ini dititik-beratkan pada sifat dimer air seperti geometri molekul, energi, frekuensi vibrasi dan momen dipol. Penelitian ini juga dikonfirmasi dengan data eksperimen yang tersedia. Juga dilakukan studi potensial interaksi dan pengaruhnya terhadap geometri dan energi ikatan yang berhubungan dengan efek basis set superposisi. Analisis CSOV dilakukan untuk mempelajari sifat interaksi yang meliputi aspek elektrostatik, polarisasi dan transfer muatan. Penelitian ini membuktikan bahwa metode HF/SCF lebih unggul dalam mendiskripsikan struktur elektronik dan geometri molekul dimer air dibanding metode MP2.

*Kata Kunci* : dimer air, ab initio, himpunan basis, himpunan basis, MP2, CSOV

**PENDAHULUAN**

Atom hidrogen yang terikat kepada dua atau lebih atom lainnya dengan elektronegatifitas tinggi seperti F, N dan O maka ikatan yang terjadi disebut ikatan hidrogen. Terjadi interaksi dipol-dipol antara atom hidrogen dengan atom-atom tersebut dalam suatu ikatan polar. Secara makroskopik, efek ikatan hidrogen dapat diamati pada peningkatan titik didih dan titik leleh dari NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O dan HF sedangkan pada tingkat molekuler, terjadi pengurangan jarak antar atom jauh dibawah jumlah jari-jari van der Waals [Chang, 1994].

Terdapat tiga pendekatan untuk menerangkan sifat gaya ikatan hidrogen. Yang pertama adalah pendekatan kovalen murni dimana atom hidrogen dianggap bervalensi dua. Hal ini membutuhkan penggunaan orbital 1s untuk pembentukan ikatan yang pertama dan orbital 2s atau 2p untuk ikatan yang kedua. Karena selisih energi yang relatif besar antara orbital 1s dan 2p pada atom hidrogen maka adanya hidrogen bervalensi dua tidak diharapkan walaupun untuk ikatan hidrogen yang pendek hasil perhitungan menunjukkan adanya kontribusi kovalensi. Pendekatan

2 Juli 2010

kedua melibatkan struktur resonansi dan pendekatan ketiga memandang ikatan hidrogen sebagai interaksi elektrostatik murni [Selbin *et al*, 1987].

Dari uraian di atas dapat dilihat bahwa tidak terdapat gambaran kuantitatif yang jelas mengenai sumbangan berbagai gaya dalam pembentukan ikatan hidrogen. Pada penelitian ini, metode komputasi digunakan untuk menghitung kontribusi efek momen dipol, polarisasi dan transfer muatan terhadap kekuatan ikatan hidrogen antar molekul dimana model yang dikaji adalah dimer air,  $(\text{H}_2\text{O})_2$ . Kimia komputasi merupakan jembatan yang menghubungkan landasan teoritis dengan hasil eksperimen. Parameter dan perhitungan kimia yang ada dibentuk menjadi model dan diselesaikan melalui metode komputasi yang terprogram dalam perangkat lunak komputer.

Pada penelitian ini akan dilakukan perhitungan kimia komputasi terhadap dimer air menggunakan dua tingkat teori, yaitu SCF (*Self-Consistent Field*) dan MP2 (*Møller-Plesset Perturbation theory*) dengan himpunan basis 6-31G(d) [Bacskay *et al*, 1996]. Perhitungan geometri kesetimbangan dilakukan dalam skema BSSE (*Basis Set Superposition Effects*) sedangkan analisis energi ikatan hidrogen dilakukan dalam batasan pengaruh efek polarisasi, transfer muatan dan momen dipol.

Karena melibatkan distribusi elektron maka metode komputasi yang digunakan adalah teori struktur elektron, yaitu *ab initio* dengan perangkat lunak *Gaussian 98* [Frisch *et al*, 1996]. Pada penelitian ini, metode komputasi digunakan untuk menghitung kontribusi efek momen dipol, polarisasi dan transfer muatan terhadap kekuatan ikatan hidrogen pada dimer air,  $(\text{H}_2\text{O})_2$ .

## METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan perangkat keras komputer berprosesor ganda (*dualprocessor*) Intel Pentium III 800 Mhz dengan DDRAM 512 MB berbasis sistem operasi Linux Mandrake versi 10.0, sedangkan perangkat lunak yang digunakan adalah *Gaussian 98*, *Molden 4.0*. dan *GaussSum 0.8*. *Gaussian 98* digunakan untuk melakukan semua perhitungan komputasi molekuler; *Molden 4.0* digunakan untuk melihat keluaran (*viewer*) dari hasil perhitungan *Gaussian 98* dan *GaussSum 8.0* digunakan untuk melihat spektrum IR hasil perhitungan frekuensi oleh *Gaussian 98*.

Pertama-tama dibuat koordinat internal molekul dimer air menggunakan format Z-matriks kemudian dioptimasi menggunakan metode SCF dan MP2 pada himpunan basis 6-31G(d) yang sangat umum digunakan dalam perhitungan struktur elektron [Frisch *et al*, 1996], hingga diperoleh

2 Juli 2010

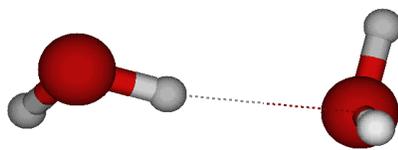
struktur yang paling stabil (tidak ada bilangan imajiner). Struktur inilah yang akan digunakan untuk perhitungan selanjutnya.

Dari struktur dimer air yang akan dimodelkan (Gambar 1), dilakukan perhitungan komputasi dengan memvariasikan: Jarak ikatan hidrogen antar monomer ( $r_3$ ) yang merupakan sumbu utama ( $Z$  axis), sudut ikatan hidrogen ( $a_3$ ), yaitu sudut antara sumbu utama dan bidang-tegak lurus sumbu (*dummy atom*) dan ( $a_4$ ) yaitu sudut tekuk (*bend*) atom hidrogen pada monomer kedua dengan ikatan hidrogen/sumbu utama.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Geometri Dimer Air

Geometri dimer air hasil optimasi dalam model bentuk tongkat bola-tongkat (*ball & stick*) disajikan dalam Gambar 2.



Gambar 2. Struktur dimer air model bola-tongkat (*ball & stick*)

Parameter geometri yang dihitung pada penelitian ini sebagaimana telah didefinisikan pada Gambar 1. Hasil penelitian ini membuktikan bahwa ikatan hidrogen terjadi antara atom hidrogen ( $H_3$ ) dari molekul  $H_2O(1)$  atau monomer pertama dengan atom oksigen monomer kedua ( $O_4$ ). Ikatan hidrogen antara atom  $H_3$  dan  $O_4$  terjadi pada sumbu  $z$ . Dari struktur kesetimbangan dimer air, struktur yang diperoleh sangat stabil karena umumnya struktur dimer air atau  $(H_2O)_2$  memiliki simetri  $C_1$ . Dari penelitian ini, baik metode SCF maupun MP2 menghasilkan geometri yang sama.

Perbandingan hasil optimasi geometri untuk metode SCF dan MP2 diberikan dalam Gambar 3.

Gambar 3. Perbandingan optimasi geometri metode SCF dan MP2

**Energi ikatan hidrogen**

Hasil perhitungan ini dibandingkan dengan hasil perhitungan Brian dkk. yang menggunakan himpunan basis yang lebih kompleks, yaitu 6-31+G(d,p) (*J. Chem. Phys.* 92 (2), 1990).

Tabel 1. Energi ikatan hidrogen dimer air (hartree \*)

Struktur	Metode		Brian <i>et al.</i>	
	SCF	MP2	SCF	MP2
(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>	-152,028246	-152,04369	-152,07049	-152,48207
2 H <sub>2</sub> O	-152,02149	-152,030438	-152,06246	-152,47177
$\Delta E$	-0,006756	-0,013252	-0,00803	-0,0103

Dari energi ikatan hidrogen pada Tabel 1, dapat dilihat bahwa metode MP2 memiliki energi ikatan hidrogen yang lebih negatif atau lebih stabil dibandingkan metode SCF. Hal ini terjadi karena metode MP2 memperhitungkan korelasi elektron sehingga sistem yang dihitung memiliki kestabilan yang lebih tinggi. Energi ikatan hidrogen yang diberikan adalah nilai energi total tanpa memperhitungkan nilai ZPE (*zero point energy*).

Untuk membandingkan hasil yang diperoleh dengan hasil perhitungan Morokuma dkk. yang menggunakan parameter hasil eksperimen. Pada Tabel 2 disajikan perbandingan dengan hasil hasil Morokuma dkk.<sup>13</sup>

Tabel 2. Perbandingan energi ikatan hidrogen dengan hasil eksperimen (kkal.mol<sup>-1</sup>).

Hasil perhitungan		Morokuma dkk.
SCF	MP2	
-4,239	-8,3	-5,6

2 Juli 2010

Hasil pada Tabel 2 menunjukkan bahwa perhitungan energi ikatan hidrogen dengan metode SCF mendekati nilai eksperimental.

### Basis set superposition effects (BSSE)

Hasil perhitungan menunjukkan masing-masing nilai BSSE untuk metode SCF dan MP2 berturut-turut adalah 0,43 dan 0,95 kkal.mol<sup>-1</sup>. Hasil ini menunjukkan bahwa BSSE untuk metode MP2 pengaruhnya cukup signifikan terhadap struktur dimer air yang dihasilkan. Metode MP2 melibatkan korelasi elektron sehingga superposisi himpunan basis memiliki pengaruh yang signifikan.

### Interaksi antar monomer dengan metode CSOV

Tujuan perhitungan CSOV adalah untuk menganalisis interaksi antara kedua monomer air pada menggunakan metode SCF dan MP2 untuk menganalisis komponen yang sangat berpengaruh dalam pembentukan ikatan hidrogen (geometri, arah dan sifat linier ikatan hidrogen).

Komponen energi yang dianalisis adalah: Komponen elektrostatik (**ES**), polarisasi (**PL**) dan transfer muatan (**CT**). Hasil perhitungan disajikan dalam Tabel 3.

Tabel 3. Komponen energi (kkal.mol<sup>-1</sup>) pada optimasi geometri dimer air

Komponen	Metode	
	SCF	MP2
ES*	-10,5	-7,4
PL*	-0,6	-0,3
CT*	-2,4	-1,0
$\mu_z/ea_0$	2,2	2,6

\*) ES = electrostatic, PL = polarization interaction, CT= charge transfer

Perhitungan komponen energi ikatan hidrogen pada Tabel 3 di atas menunjukkan bahwa komponen energi elektrostatik lebih dominan daripada sumbangan transfer muatan. Dari Hasil ini juga diperoleh bahwa metode MP2 memberikan hasil yang lebih rendah dibandingkan metode SCF.

**KESIMPULAN**

1. Penelitian ini berhasil menghitung parameter-parameter molekul dimer air menggunakan metode SCF dan MP2.
2. Optimasi jarak ikatan hidrogen metode SCF dan MP2 berturut-turut adalah 2,0381 dan 1,9733. Hasil eksperimen jarak ikatan  $\text{-H}\dots\text{O}\dots\text{H}$  adalah 1,944 Å.
3. Sudut bidang datar-Z atau bidang ikatan hidrogen masing-masing  $183^\circ$  dan  $193^\circ$ . Hasil eksperimen menunjukkan  $176,7^\circ$ .
4. Sudut antara bidang datar dan ikatan  $\text{-OH}$  monomer kedua masing-masing  $109^\circ$  dan  $97^\circ$  untuk SCF dan MP2. Hasil eksperimen sudut  $\text{-OH}$  adalah  $104,1^\circ$ .
5. Energi ikatan hidrogen dengan metode SCF  $\approx 4,2 \text{ kkal.mol}^{-1}$  menunjukkan kemiripan dengan hasil eksperimen.
6. Hasil analisis CSOV komponen energi ikatan hidrogen dengan metode SCF menunjukkan bahwa komponen energi elektrostatik mendominasi energi ikatan hidrogen.
7. Hasil perhitungan puncak-puncak serapan IR menunjukkan kesesuaian dengan hasil eksperimen.
8. Penelitian ini membuktikan bahwa metode SCF lebih unggul dalam mendeskripsikan struktur elektronik dan geometri molekul dimer air dibanding metode MP2.

## DAFTAR PUSTAKA

1. Chang, Raymond, (1994), *Chemistry*, McGraw-Hill., Inc., New York
2. Cox, P.A., (1989), *The Elements, Their Origin, Abundance and Distribution*, Oxford University Press, New York.
3. Foresman, J.B., Frisch, Æ., (1993), *Exploring Chemistry with Electronic Structure Method*, 2<sup>th</sup> edition, Gaussian, Inc., Pittsburg, P.A.
4. Glendening, Erick D., (2005), *J.Phys. Chem A*, 109, 11936-11940.
5. Ghosh, Sujit K.and Bharadwaj, Parimal K., (2003), *Inorganic Chemistry*, 42, 8250-88254
6. Huheey, James E., (1993), *Inorganic Chemistry : Principles of structure and reactivity*, 4<sup>th</sup>, HarperCollins College Publishers.
7. Leach, Andrew R., 2001, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, 2<sup>nd</sup>, Pearson Education Limited, London
8. Martoprawiro, M.A. and Bacskay, George B., (1995), *Molecular Physics*, 85, 3, 573-585.
9. M.C. Day, Jr.and Joel Selbin (1984), *Theoretical Inorganic Chemistry*, Mc Graw-Hill Inc, New York
10. Piquemal, Jean-Philip, (2003), *J.Phys. Chem A*, 107, 10353-10359
11. Surdia, N.M, (1993), *Ikatan dan Struktur Molekul*, Dep.P & K, Bandung.
12. Morokuma, Keiji, (1977), *Acc. Of Chem. Res*, 10, 294-300.
13. Smith, Brian J., Swanton, David J., Pople, John A. And Schaefer, Henry F, (1990), *J. Chem. Phys*, 92, 2, 1240-1247.
14. Umeyama, Hideaki and Morokuma, Keiji, (1977), *JACS*, 99, 5, 1316-1332.