

PERHITUNGAN MOMEN DWIKUTUB MOLEKUL AIR DENGAN TEORI GRUP

Asrial

*Jurusan Pendidikan MIPA FKIP Universitas Jambi, Kampus Pinang Masak, Jambi, Indonesia
e-mail : organozinn@yahoo.de; Telp.: 0741-7007454/081319074907*

ABSTRAK

Telah dilakukan perhitungan momen dwikutub molekul air dengan teori grup. Perhitungan dengan teori grup didasarkan pada simetri molekul dengan orbital atom sebagai fungsi basis. Dengan menerapkan operasi simetri pada fungsi basis dapat disusun tabel karakter yang merupakan dasar untuk perhitungan sifat fisik molekul, termasuk momen dwikutub. Dari perhitungan yang dilakukan diperoleh momen dwikutub molekul air sebesar 1,8412 debye yang tidak jauh berbeda dengan angka literatur yaitu 1,84 debye.

Kata kunci: molekul air, teori grup

ABSTRACT

Calculation of dipole moment of water molecule was done using group theory. Calculation using group theory is based on the symmetry of molecule with orbital atom as the basis function. By applying the character of group on basis function, the character table could be arranged as base of the calculation of molecule physical properties, including dipole moment. The result of calculation indicates that the dipole moment of water molecule using group theory was 1.842 debye. It does not differ much from the literature, that is 1.84 debye.

Keywords: Water molecule , grup theory

PENDAHULUAN

Dibandingkan dengan bidang kimia fisika yang lain, perkembangan kimia kuantum relatif lambat. Hal ini disebabkan masih belum banyaknya penelitian pada bidang ini karena masih adanya anggapan bahwa bidang kimia kuantum hanya merupakan teori dan pengetahuan belaka tanpa adanya kemungkinan di kembangkan lebih lanjut. Disisi lain hasil penelitian di bidang ini juga sulit di terapkan secara langsung untuk pemenuhan kebutuhan masyarakat. Pada kenyataannya seorang kimiawan tidak bisa melepaskan diri dari mendiskusikan masalah-masalah kimia tanpa menggunakan teori kimia kuantum.³⁾

Kebanyakan penelitian di bidang kimia kuantum merupakan pengkajian secara teoritis yang dilakukan dengan metode non-empiris murni (ab initio method) dan metode semi empiris (semi empirical method). Pada tahun-tahun terakhir ini perkembangan metode semi empiris sudah dirasakan penting dalam penginterpretasian sifat fisik atom atau molekul secara jelas.⁶⁾ Disisi lain perhitungan secara teoritis di dalam kimia kuantum dapat dijadikan penolong untuk mengatasi kesenjangan dalam penelitian.⁴⁾

Pada penentuan sifat fisik molekul pada metode semi empiris, konfigurasi elektron dibagi atas dua bagian, yaitu konfigurasi elektron kulit dalam dan konfigurasi elektron

kulit luar. Dari kedua konfigurasi elektron itu, hanya konfigurasi elektron luar yang diperhitungkan fungsi gelombang elektroniknya, sedangkan elektron kulit dalam dianggap mempunyai medan statis bersama dengan inti atom.¹⁾

Penentuan beberapa sifat fisik molekul melalui metode semi empiris dapat dilakukan dengan bantuan teori grup yang didasarkan sepenuhnya pada simetri molekul. Melalui simetri molekul dapat diketahui apakah sifat fisik itu memiliki harga sama dengan nol atau tidak sama dengan nol. Hal ini dapat diketahui dari hasil perkalian langsung (direct product) representasi taktereduksi dari fungsi basisnya. Pembahasan mengenai simetri molekul merupakan rangkuman sistematis mengenai logika tentang simetri objek. Oleh sebab itu pembahasannya sistematis dan aturannya dapat diterapkan secara mekanis, langsung dan pada beberapa bidang tertentu teori ini memberikan metode langsung yang sederhana dan perhitungan yang minim untuk sampai pada kesimpulan.²⁾

Pada tulisan ini akan dipaparkan hasil perhitungan momen dwikutub molekul air dengan teori grup. Dilihnya molekul air disebabkan oleh luasnya penggunaan senyawa ini pada kegiatan di laboratorium dan termasuk molekul sederhana.

METODE

Bahan dan alat

Perhitungan ini dilakukan secara teori yang membutuhkan (1) seperangkat komputer, (2) flashdisk, (3) bahasa pemrograman C++, (4) kertas dan (5) alat tulis.

Perhitungan momen dwikutub molekul air menggunakan teori grup

Langkah-langkah perhitungan momen dwikutub molekul air dengan menggunakan teori grup adalah sebagai berikut:

1. Menentukan simetri molekul air.²⁾
 2. Menentukan orbital atom pembentuk molekul air.
 3. Menyusun tabel karakter orbital molekul air.
 4. Menentukan kombinasi linear orbital atom teradaptasi-simetri.
 5. Menentukan determinan sekuler.
 6. Menentukan energi dan orbital molekul dari kombinasi linear orbital atom.
 7. Menentukan momen dwikutub molekul air.
- Perhitungan didasarkan pada persamaan berikut.

$$\mu^2 = |\mu^2| = \mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2$$

Dimana : $\mu_x^2 = \int \psi^* x \psi d\tau$

$$\mu_y^2 = \int \psi^* y \psi d\tau$$

$$\mu_z^2 = \int \psi^* z \psi d\tau$$

PEMBAHASAN

Orbital molekul air dan energinya

Molekul-molekul dapat digolongkan berdasarkan simetrinya dan dengan

penggolongan itu dapat ditentukan sifat-sifat suatu molekul tanpa memerlukan perhitungan yang terinci. Misalnya dalam menentukan kombinasi linear orbital atom dari suatu molekul, menentukan apakah suatu molekul bersifat polar atau bukan dan menentukan momen dwikutub suatu molekul.

Pembahasan terinci tentang simetri disebut teori grup. Sebagian besar teori ini merupakan rangkuman sistematika mengenai logika tentang simetri objek. Pada kebanyakan kasus teori ini memberikan metode langsung dan sederhana untuk sampai pada kesimpulan dengan perhitungan yang minim.²⁾ Teori grup dapat menyederhanakan perhitungan-perhitungan dan mempermudah dalam menarik suatu kesimpulan tentang sifat-sifat suatu molekul.

Pada pembentukan molekul air dilibatkan enam orbital atom yang merupakan fungsi basis. Untuk menentukan representasi tak tereduksi dari masing-masing fungsi basis perlu dilakukan operasi simetri terhadap masing-masing fungsi tersebut. Hasil operasi simetri terhadap masing-masing fungsi basis molekul air dapat dilihat pada Tabel 1 berikut.

Tabel 1. Hasil operasi simetri pada orbital atom pembentuk molekul air

Jenis Simetri	Orbital Atom
a ₁	($\phi_1 + \phi_2$), ϕ_3 dan ϕ_6
a ₂	Tidak ada
b ₁	ϕ_4
b ₂	($\phi_1 - \phi_2$) dan ϕ_5

Catatan :

$$\phi_1 = 1s_a; \phi_2 = 1s_b; \phi_3 = 2s; \phi_4 = 2p_x; \phi_5 = 2p_y; \phi_6 = 2p_z;$$

Didasarkan pada jenis simetri masing-masing orbital dan dengan bantuan operator proyeksi dapat diperoleh kombinasi linear teradaptasi-simetri untuk molekul air sebagai berikut.

$$\Psi(a_1)_1 = 1/\sqrt{2}(\phi_1 + \phi_2); \Psi(a_1)_2 = \phi_3;$$

$$\Psi(a_1)_3 = \phi_6; \Psi(b_1) = \phi_4;$$

$$\Psi(b_2)_1 = 1/\sqrt{2}(\phi_1 - \phi_2); \Psi(b_2)_2 = \phi_5;$$

Dari kombinasi linear teradaptasi-simetri ini dapat ditentukan energi masing-masing kombinasi linear orbital atom penyusun orbital molekul air. Penentuan nilai-nilai energi ini memerlukan penyelesaian determinan sekuler yang disusun berdasarkan representasi tak tereduksi orbital molekul air. Penyelesaiannya memberikan 6 nilai energi yang bersesuaian dengan jumlah orbital molekul. Empat dari enam nilai energi tersebut berharga negatif yang merupakan orbital molekul yang terisi elektron, sedangkan 2 orbital molekul lain memiliki nilai energi positif dan merupakan molekul yang tidak terisi elektron.

Prasad (2006) menyatakan bahwa urutan energi untuk setiap orbital molekul sesuai dengan konfigurasi elektron dalam keadaan dasar molekul air.⁵⁾ Oleh karena itu secara lengkap urutan energi orbital molekul air tersaji pada **Tabel 2** berikut.

Tabel 2. Energi orbital molekul air hasil perhitungan dengan teori grup

Orbital molekul	Energi orbital (eV)	Cacah elektron pengisi
1a ₁	-43,6939	2
1b ₂	-21,2349	2
2a ₁	-19,4030	2
1b ₁	-17,7600	2
3a ₁	12,6435	0
2b ₂	18,8139	0

Dari nilai-nilai energi tersebut dapat ditentukan koefisien setiap orbital atom penyusun kombinasi linear orbital atom sebagaimana terlihat pada Tabel 3 berikut.

Tabel 3. Koefisien orbital atom penyusun orbital molekul air hasil perhitungan teori grup

Orbital Molekul	Koefisien dan orbital atom penyusun
1a ₁	$0,3551(\phi_1 + \phi_2) + 0,8620\phi_3 - 0,0694\phi_6$
1b ₂	$-0,4606(\phi_1 - \phi_2) + 0,7588\phi_5$
2a ₁	$-0,3009(\phi_1 + \phi_2) + 0,3161\phi_3 + 0,8479\phi_6$
1b ₁	ϕ_4
3a ₁	$0,5323(\phi_1 + \phi_2) - 0,3963\phi_3 - 0,5255\phi_6$
2b ₂	$-0,5365(\phi_1 - \phi_2) - 0,6514\phi_5$

Catatan : $\phi_1 = 1s_a$; $\phi_2 = 1s_b$; $\phi_3 = 2s$; $\phi_4 = 2p_x$; $\phi_5 = 2p_y$; $\phi_6 = 2p_z$;

Dari **Tabel 3** di atas dapat dilihat bahwa orbital molekul 1a₁ merupakan hibridisasi sebagian besar orbital 2s dengan orbital 2p_z atom oksigen yang bergabung dengan orbital 1s dari atom hidrogen pertama dan dari atom hidrogen yang kedua. Orbital molekul 1a₁ memberikan densitas elektron yang mencakup ketiga inti atom penyusun molekul air, oleh karena itu dapat dinyatakan bahwa orbital molekul ini merupakan orbital

molekul ikatan. Orbital molekul 1b₂ disusun oleh orbital 2p_y atom oksigen yang merupakan cuping positif pada sisi atom hidrogen, oleh karena cuping positif itu digabung dengan orbital 1s dari kedua atom hidrogen maka orbital molekul 1b₂ memberikan densitas elektron antara inti atom hidrogen pertama dan inti atom oksigen. Analog dengan hal itu cuping 2p_y negatif akan bergabung dengan orbital 1s atom hidrogen kedua. Oleh karena orbital 1b₂ ini memberikan sumbangan pada pembentukan ikatan molekul air, maka orbital ini merupakan orbital ikatan. Jika dibandingkan orbital molekul 1b₂ dengan orbital molekul 2a₁, pada orbital molekul 2a₁ sumbangan orbital 1s dari atom oksigen tidak begitu besar, hal itu dapat dilihat dari kecilnya koefisien orbital 1s tersebut pada penyusunan kombinasi linear orbital atom.

Orbital molekul 1b₁ sepenuhnya merupakan pasangan elektron orbital atom 2p_x atom oksigen yang merupakan orbital non ikatan. Faktanya orbital ini merupakan orbital berisi pasangan elektron bebas pada molekul air.

Hibridisasi orbital 2s dengan orbital 2p_z atom oksigen pada orbital 3a₁ memberikan probabilitas densitas elektron yang tertumpuk di sepanjang sumbu z negatif yang jauh dari atom hidrogen. Oleh sebab itu orbital molekul ini tidak memberikan dampak apa-apa pada ikatan molekul air. Dengan demikian orbital molekul 3a₁ adalah orbital

molekul anti ikatan. Sama halnya dengan orbital molekul $3a_1$ orbital $2b_2$ juga merupakan orbital anti ikatan. Densitas elektron orbital $2p_y$ pada pembentukan orbital molekul ini tersebar arah sumbu x yang terpisah dengan orbital $1s$ dari kedua atom hidrogen. Dengan demikian probabilitas densitas elektronnya tidak memberikan sumbangan pada pembentukan molekul air.

Simetri molekul dan momen dwikutub molekul air

Salah satu aplikasi dari simetri adalah menghitung momen dwikutub dari suatu molekul. Disebabkan setiap operasi simetri menghasilkan konfigurasi yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari konfigurasi semula, maka arah dan besarnya vektor yang dimiliki oleh molekul tidak mengalami perubahan karena adanya operasi simetri.²⁾ Jika molekul memiliki sumbu sejati, maka momen dwikutubnya akan terletak disepanjang sumbu sejati tersebut. Seandainya suatu molekul memiliki lebih dari satu sumbu sejati yang sesamanya saling bertolak belakang maka momen dwikutub pada molekul tersebut akan sama dengan nol. Jika pada molekul mempunyai bidang simetri, maka momen dwikutub akan terletak pada bidang tersebut. Sama halnya dengan sumbu sejati bila pada molekul terdapat lebih dari satu bidang simetri maka momen dwikutub akan terletak pada perpotongan antar bidang itu. Pada molekul air momen

dwikutub terletak pada sumbu C_2 yang juga merupakan perpotongan dua bidang simetri. Molekul yang mempunyai pusat simetri tidak mempunyai momen dwikutub karena molekul yang demikian memiliki vektor yang arahnya saling bertolak belakang.

Dari perhitungan yang dilakukan dengan teori grup diperoleh harga momen dwikutub untuk setiap orbital molekul yang dapat dilihat seperti berikut.

$$\begin{aligned}\mu_{\psi_1} &= \mu_1 = 0,77325 \text{ d;} \\ \mu_{\psi_2} &= \mu_2 = 0,50552 \text{ d;} \\ \mu_{\psi_3} &= \mu_3 = 0,85864 \text{ d;} \\ \mu_{\psi_4} &= \mu_4 = 0,54734 \text{ d;} \\ \mu_{\psi_5} &= \mu_5 = 0,76039 \text{ d;} \\ \mu_{\psi_6} &= \mu_6 = 0,95990 \text{ d;} \end{aligned}$$

Dari nilai orbital di atas dengan menggunakan rumus

$$\begin{aligned}\mu_{H_2O}^2 &= \mu_1^2 + \mu_2^2 + \mu_3^2 + \mu_4^2 + \mu_5^2 + \mu_6^2 \\ &= 3,38985 \text{ debye}^2 \end{aligned}$$

sehingga diperoleh momen dwikutub molekul air secara total sebesar 1,8412 debye yang hampir sama besarnya dengan momen dwikutub air pada literatur dan hasil percobaan yang berturut-turut 1,84 debye,⁴⁾ dan 1,8198 debye.¹⁾

KESIMPULAN

Teori grup dapat digunakan untuk menghitung nilai momen dwikutub molekul air. Nilai momen dwikutub molekul air yang diperoleh dari perhitungan dengan teori grup 1,8412 debye.

UCAPAN TERIMAKASIH

Dengan selesainya penelitian ini kami haturkan terimakasih kepada Kepala Laboratorium ISITEKS Imogiri Bantul dan Laboratorium Komputer UPMIPA Universitas Jambi beserta staf yang telah menyediakan fasilitas.

DAFTAR PUSTAKA

1. Asrial, **1996**, *Perhitungan Momen Dwikutub Molekul Air Dengan Metode CNDO/2*, Tesis, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
2. Atkins, P. W., **2009**, *Physical Chemistry*, 9th edition, Oxford University Press, New York.
3. Moertolo, A., Ali, M., Said, M., Arbi, M., Yamamoto, M., Yamada, K., **1984**, *Kimia Kuantum untuk Penggemar Kimia di Indonesia*, PT. Bina Ilmu, Surabaya.
4. Pilar, F.L., **2001**, *Elementary Quantum Chemistry*, Second edition, McGraw-Hill Inc., Singapore.
5. Prasad, R. K., **2006**, *Quantum Chemistry*, 3rd edition, New Age International Publishers, New Delhi.
6. Sadlej, J., Cooper, I. L., **1985**, *Semi-Empirical Methods of Quantum Chemistry*, Ellis Horwood Limited, New York.