

# KIMIA KUANTUM UNTUK PEREKAYASA NANOMATERIAL

KARNA WIJAYA

AKHMAD SYOUFIAN

IQMAL TAHIR

AULIA SUKMA HUTAMA



GADJAH MADA UNIVERSITY PRESS

# KATA PENGANTAR

Saat ini, aplikasi nanomaterial banyak dikembangkan untuk katalis berbagai reaksi kimia. Penelitian terkait modifikasi bahan kimia menjadi nanomaterial untuk meningkatkan efektivitas performa bahan tersebut. Untuk memudahkan proses modifikasi dapat dilakukan rekayasa nanomaterial dengan pendekatan teori kimia kuantum.

Dalam upaya memberikan pemahaman terkait teori kimia kuantum yang dapat digunakan untuk merekayasa nanomaterial, penulis menulis buku dengan judul *Kimia Kuantum untuk Perekrayasa Nanomaterial*. Buku ini memberikan pemaparan terkait dasar pemahaman kuantum, yaitu dari bidang matematika yang meliputi sistem koordinat, determinan, vektor, bilangan kompleks, dan persamaan eigenvalue serta bidang kimia yang meliputi sifat-sifat atom dan ikatan kimia. Teori tentang mekanika klasik dan mekanika kuantum juga dipaparkan untuk menjelaskan apa perbedaan keduanya. Untuk memberikan gambaran bagaimana aplikasi secara langsung mekanika klasik dan kuantum dipaparkan juga terkait aplikasi mekanika klasik dan kuantum yang meliputi Penentuan Energi Elektron  $\pi$  ( $\pi$ ) dengan Pendekatan Partikel dalam Box 1 Dimensi, Penentuan Panjang Gelombang Warna Serapan Senyawa Poliena Terkonjugasi, Penentuan Energi Elektron  $\pi$  ( $\pi$ ) dengan Metode HMO, dan Spektroskopi.

Buku ini tidak akan terwujud tanpa ridho-Nya dan bantuan beberapa orang. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis mengucapkan puji syukur ke hadirat Allah Swt. yang telah memberikan kemampuan kepada penulis untuk menyelesaikan buku ini. Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada Farida dan Azizatul Karimah yang telah membantu dalam penulisan buku ini, menuangkan kritik dan saran, serta kepada keluarga penulis yang selalu memberikan dukungan

untuk selalu berkarya dengan sepenuh hati. Penulis juga mohon maaf atas segala kekurangan yang mungkin masih terdapat dalam buku ini. Harapannya buku ini dapat memberikan pemahaman yang baik kepada pembaca terkait kimia kuantum untuk perekayasa nanomaterial.

Yogyakarta, 19 Juni 2019

# DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	xi
DAFTAR TABEL.....	xv
<b>BAB I</b> <b>MATEMATIKA PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
1.1    Sistem Koordinat .....	1
1.2    Determinan .....	6
1.3    Vektor .....	7
1.4    Bilangan Kompleks .....	11
1.5    Operator .....	12
1.6    Persamaan Nilai <i>Eigen</i> .....	14
<b>BAB II</b> <b>MEKANIKA KLASIK.....</b>	<b>17</b>
2.1    Sistem Konservatif.....	17
2.2    Persamaan Gerak Lagrange dan Hamilton .....	18
2.3    Koordinat Internal dan Gerakan Pusat Massa.....	22
2.4    Asumsi Dasar Mekanika Klasik.....	24
<b>BAB III</b> <b>MEKANIKA KUANTUM .....</b>	<b>27</b>
3.1    Spektra Atom, Radiasi Benda Hitam, dan Efek Fotolistrik .....	28
3.2    Formula Mekanika Kuantum .....	38
3.3    Postulat Mekanika Kuantum.....	38
3.4    Aplikasi Postulat pada Sistem Sederhana.....	45
3.5    Teori Perturbasi .....	54
<b>BAB IV</b> <b>SPEKTROSKOPI DAN PENGUKURAN SPEKTROSKOPIK .</b>	<b>63</b>
4.1    Sistem Satuan.....	65
4.2    Kekuatan Absorpsi.....	65

	4.3 Tipe-Tipe Spektroskopi .....	73
BAB V	APLIKASI MEKANIKA KLASIK DAN MEKANIKA KUANTUM.....	79
	5.1 Ikatan Antaratom.....	79
	5.2 Ikatan Antarmolekul .....	81
	5.3 Fungsi Gelombang Ortonormal dari Orbital Hibrida.....	84
	5.4 Penentuan Energi Elektron Pi ( $\pi$ ) dengan Pendekatan Partikel dalam <i>Box</i> 1 Dimensi.....	86
	5.5 Penentuan Panjang Gelombang Warna Serapan Senyawa Poliena Terkonjugasi .....	87
	5.6 Penentuan Energi Elektron Pi ( $\pi$ ) dengan Metode HMO (Orbital Molekul Huckel) .....	88
BAB VI	SIFAT-SIFAT ATOM .....	95
	6.1 Spektrum dan Atom Hidrogen.....	96
	6.2 Energi Ionisai dan Afinitas Elektron .....	98
	6.2.1 Energi Ionisasi .....	98
	6.2.2 Afinitas Elektron.....	102
	6.3 Prinsip Aufbau dan Klasifikasi Periodik .....	103
	6.3.1 Bilangan-Bilangan Kuantum.....	103
	6.3.2 Bentuk Orbital dan Konfigurasi Elektron...	105
BAB VII	IKATAN ION .....	117
	7.1 Jari-Jari Atom dan Ukuran Ion .....	120
	7.2 Struktur Kristal.....	123
	7.3 Energi Kisi (Lingkar Born-Haber) .....	126
	7.4 ELEKTRONEGATIVITAS DAN KEPOLARAN IKATAN .....	132
	7.4.1 Ikatan dan Energi Ikatan pada Molekul Halida (Dwiatom).....	132
	7.4.2 Energi Ikatan Tunggal.....	136
	7.4.3 Skala Elektronegativitas .....	138
	7.4.4 Keelektronegatifan dan Karakter Ion Ikatan.....	142
	7.4.5 Elektronegativitas dan Perubahan Entalpi	145

BAB VIII	IKATAN KOVALEN .....	149
8.1	Orbital Molekul Dalam $H_2$ .....	150
8.2	Teori Ikatan Valensi .....	160
8.2.1	Valensi Terarah dan Hibridasi .....	167
8.2.2	Resonansi .....	185
8.2.3	Geometri Molekul dan Teori ZSEPR.....	189
8.3	Teori Orbital Molekul (Mo) Untuk $H_2$ dan $H_2^+$ .....	190
8.4	Orbital Ikatan dan Antiikatan .....	192
8.5	Orbital Sigma, Pi, dan Prinsip Aufbau .....	193
DAFTAR PUSTAKA.....		197
INDEKS .....		199
TENTANG PENULIS.....		201



# DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1	Gerakan partikel di dalam ruangan .....	2
Gambar 1.2	Sistem koordinat Cartesian .....	2
Gambar 1.3	Sistem koordinat sferis .....	3
Gambar 1.4	Sistem koordinat silindris.....	3
Gambar 1.5	Hubungan sistem koordinat Cartesian dan koordinat polar sferis .....	6
Gambar 3.1	Intensitas radiasi benda hitam versus panjang gelombang .....	30
Gambar 3.2	Diagram peralatan efek fotolistrik.....	31
Gambar 3.3	Grafik potensial penyetop alir elektron versus frekuensi cahaya yang digunakan dalam percobaan foto-elektron.....	33
Gambar 3.4	Model atom Rutherford .....	34
Gambar 3.5	Partikel bergerak dalam kotak satu dimensi.....	45
Gambar 3.6	Skema $E_n$ dan $\psi_n$ bagi partikel yang bergerak dalam kotak satu dimensi.....	48
Gambar 4.1	Intensitas berkas cahaya pada titik yang berbeda di dalam sistem pengabsorpsi .....	66
Gambar 4.2	Gelombang elektromagnetik sebagai vektor medan magnet (B) dan listrik (E).....	68
Gambar 4.3	Prinsip dari ( <i>Electron Spin Resonance</i> ) .....	74
Gambar 4.4	Prinsip analisis dengan Spektroskopi Raman dengan contoh molekul silikat .....	76
Gambar 5.1	Ilustrasi ikatan ionik, ikatan kovalen, ikatan logam, dan ikatan antarmolekul .....	80



Gambar 5.2	Hubungan kombinasi (campuran) dari ikatan ionik, kovalen, dan/atau ikatan logam.....	81
Gambar 5.3	(a) Gaya Van der Waals dan (b) Ikatan hidrogen...	82
Gambar 5.4	Ikatan hidrogen yang kuat (a) antara O-H---O pada struktur <i>Cholinium dimesylamid</i> (b) antara O-H---N pada struktur <i>Betainium-dimesylamid</i> dan (c) antara N-H---N pada Garam onium N, N, N, N- <i>Tetramethylethylendiamin</i> $H^+(MeSO_2)_2N^-$ .....	83
Gambar 6.1	Spektrum absorpsi hidrogen.....	97
Gambar 6.2	Potensial ionisasi tingkat pertama .....	99
Gambar 6.3	Kurva kebolehjadian untuk menemukan elektron pada setiap jarak dari inti atom dalam orbital 1s .	106
Gambar 6.4	Bentuk orbital 1s .....	107
Gambar 6.5	Bentuk orbital 2p.....	107
Gambar 6.6	Bentuk orbital 3d.....	108
Gambar 6.7	Urutan tingkat energi orbital .....	109
Gambar 6.8	Diagram sederhana urutan energi orbital dalam atom .....	109
Gambar 7.1	Pembentukan ion $Na^+$ .....	118
Gambar 7.2	Pembentukan ion $F^-$ .....	118
Gambar 7.3	Pembentukan ikatan ion senyawa $NaF$ .....	119
Gambar 7.4	Ikatan koordinasi pada senyawa (A) kompleks tetrahedral $[Cu(NH_3)_4]^+$ , (B) molekul $H_2O$ memasuki lapisan solvasi kesatu dan (C) kompleks $[Cu(NH_3)_3(H_2O)]^+$ .....	126
Gambar 7.5	Kurva energi sebagai fungsi jarak antarinti untuk berbagai molekul gas.....	132
Gambar 7.6	Kurva Energi untuk gas $NaCl$ menunjukkan pada $r = 10,5 \text{ \AA}$ kedua kurva berpotongan. ....	133
Gambar 7.7	Hubungan karakter ion dan selisih elektronegativitas .....	143

Gambar 8.1	Orbital molekul dengan energi terendah pada molekul $H_2$ .....	152
Gambar 8.2	Kombinasi orbital atom untuk membentuk orbital molekul .....	153
Gambar 8.3	Kombinasi orbital atom N untuk membentuk orbital molekul $N_2$ .....	156
Gambar 8.4	Kombinasi orbital atom O untuk membentuk orbital molekul $O_2$ .....	157
Gambar 8.5	Kombinasi orbital 1s pada atom H dengan 2p pada atom F untuk membentuk orbital molekul HF .....	158
Gambar 8.6	Model ion molekul $H_2^+$ .....	161
Gambar 8.7	Fungsi kerapatan elektron di sekitar inti pada ion molekul $H_2^+$ : (a) $\psi_+$ , (b) $\psi_+^2$ , (c) $\psi_-$ , (d) $\psi_+^2$ . Fungsi gelombang masing-masing atom ditunjukkan dengan garis putus-putus .....	162
Gambar 8.8	Kontur kerapatan elektron di sekitar inti pada ion molekul $H_2^+$ .....	163
Gambar 8.9	Fungsi energi terhadap panjang ikatan untuk orbital ikatan ( $E_+$ ) dan antiikatan ( $E_-$ ) pada ion molekul $H_2^+$ .....	163
Gambar 8.10	Model molekul $H_2$ .....	164
Gambar 8.11	Orbital hibrida $BeCl_2$ .....	171
Gambar 8.12	Hibridisasi $sp^2$ .....	172
Gambar 8.13	Struktur molekul dan hibridisasi air $H_2O$ dan ammonia $NH_3$ .....	174
Gambar 8.14	Struktur molekul dan hibridisasi etilena .....	175
Gambar 8.15	Ikatan C-C pada etilena .....	175
Gambar 8.16	Struktur molekul dan hibridisasi pada asetilena ..	176
Gambar 8.17	Struktur molekul dan hibridisasi pada benzene....	177
Gambar 8.18	Pembentukan orbital molekul benzene.....	178
Gambar 8.19	Orbital d.....	179
Gambar 8.20	Orbital hibrida $sp^3d^2$ .....	180

Gambar 8.21	Struktur senyawa $\text{PF}_5$ .....	181
Gambar 8.22	Struktur senyawa $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$ .....	181

# DAFTAR TABEL

Tabel 3.1	Data hasil analisis teori perturbasi orde dua dari matriks Fock dalam basis donor-akseptor <i>Natural Bond Orbital</i> .....	61
Tabel 4.1	Data pergeseran kimia dari $^1\text{H-NMR}$ (ppm) yang diperoleh dari hasil eksperimen dan perhitungan komputasi senyawa <i>Acrolein</i> .....	64
Tabel 6.1	Potensial ionisasi tingkat pertama unsur-unsur utama .....	100
Tabel 6.2	Harga elektronegativitas unsur-unsur utama .....	103
Tabel 6.3	Daftar konfigurasi elektron pada unsur-unsur.....	114
Tabel 7.1	Daftar jari-jari atom unsur utama (dalam satuan Å)..	120
Tabel 7.2	Jarak antarion.....	121
Tabel 7.3	Jari-jari kristal (Å) .....	122
Tabel 7.4	Harga limit perbandingan jari-jari .....	124
Tabel 7.5	Contoh beberapa struktur ion.....	125
Tabel 7.6	Tetapan Madelung untuk beberapa model kristal .....	127
Tabel 7.7	Harga eksponen Born n.....	128
Tabel 7.8	Momen dwikutub listrik dan karakter ion dari hidrogen halida.....	133
Tabel 7.9	Energi ikatan senyawa halida.....	135
Tabel 7.10	Energi ikatan molekul alkali halida .....	135
Tabel 7.11	Harga energi untuk ikatan tunggal (dalam satuan kkal/mol) .....	137
Tabel 7.12	Energi ion tambahan dari ikatan dan selisih	

	elektronegativitas atom .....	138
Tabel 7.13	Harga elektronegativitas untuk beberapa unsur .....	139
Tabel 7.14	Elektronegativitas, potensial ionisasi, dan afinitas elektron.....	141
Tabel 7.15	Hubungan antara selisih elektronegativitas dengan karakter ion.....	142
Tabel 7.16	Warna spektra dan warna komplemen.....	146
Tabel 7.17	Hubungan warna dan elektronegativitas .....	146
Tabel 8.1	Tingkat ikatan beberapa molekul.....	160
Tabel 8.2	Panjang ikatan dan energi diasosiasi $H_2^+$ dan $H_2$ .....	167
Tabel 8.3	Beberapa macam hibridisasi .....	182
Tabel 8.4	Hibridisasi dan kuat panjang ikatan.....	184