

STUDI MOLEKUL n_2P_2 DENGAN GRUP SIMETRI $D_{\infty h}$ MENGUNAKAN METODE AB INITIO

Liza Devita

*Sekolah Tinggi Penyuluhan Pertanian Medan BPPSDMP Kementerian Pertanian RI
Jl. Binjai KM 10 Medan. Email:devita_liza@yahoo.com*

ABSTRACT

This research theoretically describes the molecule $n_2 p_2$ with cemetery group $d-h$ using *ab initio* /STO-3 G that is included in the package of HyperChem Pro.6.0. this study also discusses the effect of atom toward electronic features and the structure that is formed from molecule $n_2 p_2$. Moreover, this research investigated the effect of cemetery group n_1-P_2 toward molecule stability $n_2 P_2$. Research findings revealed that loop n_1-P_2 or loop P_2-P_3 could be single loop, double loop, and even triple loop. For the optimum result, the most stable molecule was CIP ($E=993242,9375$), that is the optimum result of CIPPCI. However, the most unstable molecule was PP ($E=423494,6563$), that is the optimum result of HPPH. In one group from top-down or in a period form left-right, total energy seems decrease. In other words, $n_2 P_2$ was seen more stable.

Key wordS :Ab initio, molekul n_2P_2 , grup simetri $D_{\infty h}$.

PENDAHULUAN

Kajian mengenai molekul-molekul kecil dengan satu atau dua heteroatom, akhir-akhir ini telah menjadi fokus menarik banyak riset. Penelitian mengenai molekul-molekul kecil heteroatom ini merupakan suatu tantangan besar bagi ahli-ahli kimia, baik itu ahli kimia eksperimental ataupun ahli kimia komputasi. Hal ini disebabkan, karena molekul-molekul kecil heteroatom ini, dapat diaplikasikan lebih lanjut dalam pembentukan kluster, dengan tujuan menghasilkan material-material baru dengan sifat-sifat yang lebih baik, khususnya untuk mendapatkan kluster-kluster berkualitas tinggi.

Jelas bahwa, metode komputasi, suatu metode berbasis komputer, merupakan salah satu pilihan dalam melakukan penelitian-penelitian terhadap molekul-molekul kecil heteroatom. Penelitian mengenai molekul-molekul kecil heteroatom, dengan sistem komputerisasi ini telah banyak dilakukan. Diantaranya, seperti yang telah dilakukan oleh Ornellas dan Iwata (1996). Mereka membahas mengenai struktur dan energi molekul nitrogen dan silikon, Si_2N_2 ,

dengan menggunakan metode *ab initio*. Mereka mendapatkan, Si_2N_2 dengan struktur linear adalah yang paling stabil. Masih pada tahun yang sama, Somasundram dan Handy (1996) meneliti mengenai spesies sulfur dan nitrogen dengan menggunakan metode *DFT (Density Functional Theory)*, dan didapatkan struktur yang paling stabil adalah cincin selang-seling untuk S_2N_2 dan bentuk kursi isomer (1,4) untuk S_4N_2 . Berikutnya, Pascoli dan Lavendy (1999) membahas mengenai kluster-kluster C_nP , C_nP^+ dan C_nP^- dengan menggunakan metode DFT, dan diperoleh spesies netral dan anion mempunyai efek keseimbangan ganjil-genap, sedangkan spesies kation mempunyai efek keseimbangan genap-ganjil. Selanjutnya, Chuchev dan BelBruno (2003) telah mengkaji kluster C_nP_2 yang berstruktur linear. Mereka membahas mengenai keadaan elektronik, geometri dan frekuensi harmonik dari kluster C_nP_2 tersebut dengan menggunakan metode DFT, dan membandingkannya dengan kluster C_nN_2 . Didapatkan, kluster-kluster dengan jumlah karbon ganjil mempunyai *ground state triplet* dan

kluster-kluster dengan jumlah karbon genap mempunyai *ground state singlet*, dengan perbedaan energi antara keadaan dasar dan keadaan tereksitasi adalah 0,6-0,8 eV untuk ground state triplet dan ~2,5 eV untuk ground state singlet. Serta didapatkan, sifat-sifat fisika antara kedua heteroatom ini, C_nP_2 dan C_nN_2 adalah berbeda.

Seperti terlihat dalam penelitian-penelitian di atas, dan juga dari penelusuran literatur yang telah penulis lakukan, penelitian-penelitian mengenai molekul-molekul kecil heteroatom, dari unsur nitrogen, silikon, sulfur dan karbon memang telah banyak dilakukan. Akan tetapi, penelitian mengenai molekul-molekul kecil fosfor dengan satu atau dua heteroatom, masih jarang ditemukan. Hal ini menarik perhatian penulis, karena jika dilihat dari letaknya dalam sistem periodik, fosfor satu golongan dengan nitrogen (yaitu golongan VA) dan satu periode dengan silikon dan sulfur (yaitu periode 3, terletak antara silikon dan sulfur).

Juga dapat dilihat dari penelitian-penelitian tersebut, salah satu metode perhitungan kimia komputasi yang digunakan adalah metode ab initio. Metode ini mempunyai akurasi paling tinggi dibanding metode lainnya, namun sebagai konsekuensi dari pencapaian ketelitian yang tinggi dari metode ab initio ini, diperlukan waktu operasi yang tinggi sehingga hanya mungkin diterapkan pada molekul-molekul kecil. Berdasarkan uraian di atas, maka penulis melakukan penelitian yang berjudul: Studi Molekul n_2P_2 dengan Grup Simetri D_{nh} Menggunakan Metode Ab Initio. Dimana, n adalah unsur-unsur periode 1-3 kecuali unsur gas mulia. Penelitian ini bertujuan untuk

mempelajari molekul-molekul fosfor heteroatom n_2P_2 , dengan geometri linear $nPPn$ (D_{nh}).

METODE PENELITIAN

Alat-alat yang digunakan adalah: IBM PC Compatible, Paket HyperChem Pro6.0 (metode Ab initio) dan Printer. Sistem yang diamati adalah molekul-molekul fosfor n_2P_2 grup simetri D_{nh} , dimana, n adalah unsur-unsur periode 1-3, kecuali unsur-unsur gas mulia. Masukan datanya adalah seperti terlihat dalam Gambar 1. Metode yang digunakan adalah metode ab initio, dengan *basis set*: minimal (STO-3G); *convergence limit*: 0,0001; *iteration limit*: 1000; *spin pairing*: RHF; *mechanics print level*: 3; *quantum print level*: 3; *RMS Gradient of*: 0,01 kcal/ ($\text{\AA}$ mol); *maximum cycles*: 1000.

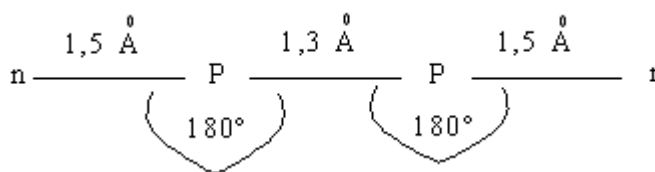
Prosedur penelitian dituliskan di Gambar 2. Dari Gambar 2 dilihat ada skema kerja optimasi molekul n_2P_2 grup simetri D_{nh} .

HASIL DAN PEMBAHASAN

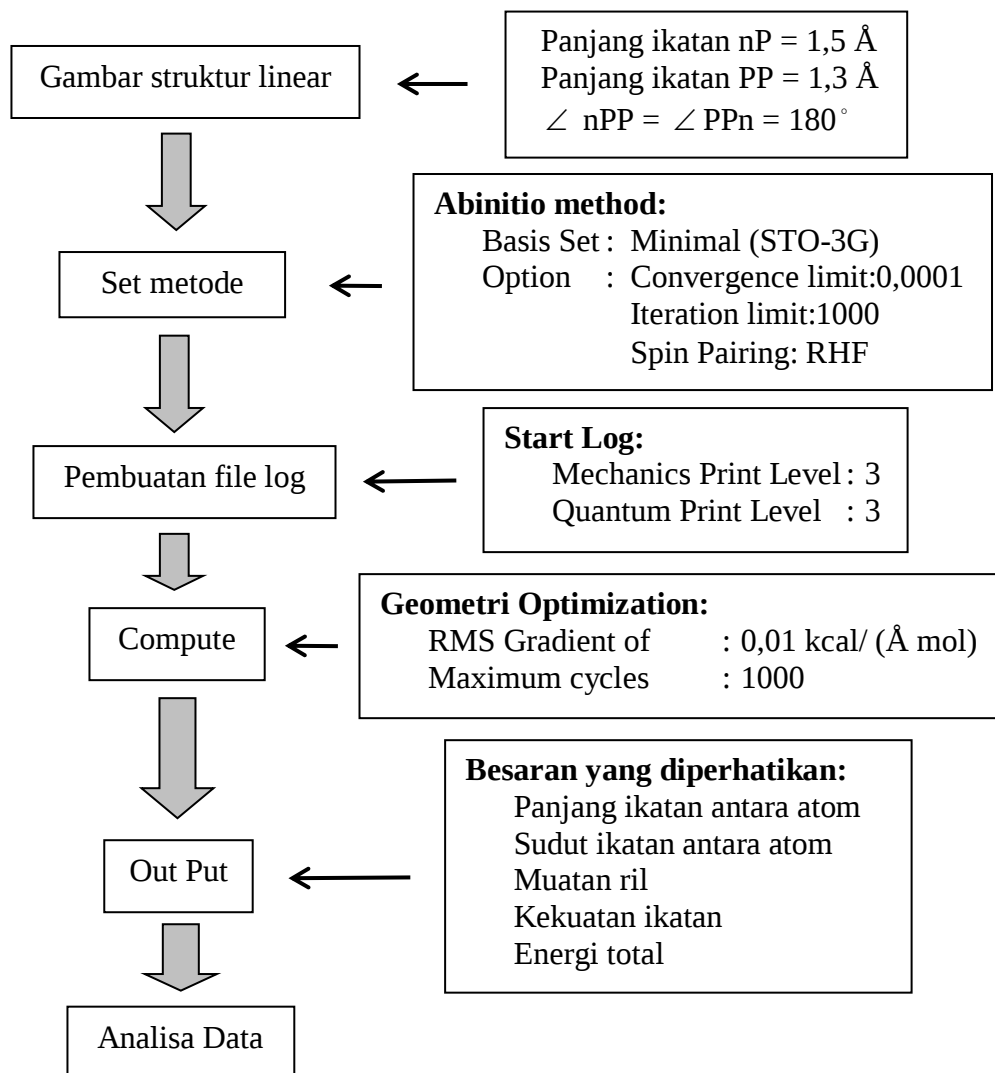
Telah dipelajari secara teoritis, molekul n_2P_2 grup simetri D_{nh} , dimana n adalah unsur-unsur periode 1-3 kecuali unsur-unsur gas mulia. Molekul-molekul ini diteliti dengan menggunakan metode ab initio/ STO-3G yang terdapat dalam paket HyperChem Pro.6.0.

Optimasi Molekul n_2P_2 Grup Simetri D_{nh}

Hasil optimasi molekul n_2P_2 grup simetri D_{nh} diperlihatkan dalam Gambar 3. Kuantitas-kuantitas penting dari struktur-struktur teroptimasi molekul n_2P_2 grup simetri D_{nh} diringkaskan dalam Tabel 1.



Gambar 1 Masukan (*input*) data Molekul n_2P_2 Grup Simetri D_{nh}

Gambar 2 Skema Kerja Optimasi Molekul n_2P_2 Grup Simetri $D_{\infty h}$

Tabel 1 Kuantitas-Kuantitas Penting dari Struktur-Struktur Teroptimasi Molekul-Molekul n_2P_2 Grup Simetri $D_{\sim h}$

Molekul	Panjang Ikatan (Å)			Sudut Ikatan		Muatan Ril				EN_n	Kekuatan Ikatan			Jari-jari (Å)		Geo
	n_1P_2	P_2P_3	P_3n_4	$\angle_{n_1P_2P_3}$	$\angle_{P_2P_3n_4}$	$n1$	$P2$	$P3$	$n4$		$n1-P2$	$P2-P3$	$P3-n4$	r_n	r_{n+p}	
HPPH	3,9605	1,8077	5,0489	173,144	4,11879	-0.005723	-0.000915	0.002073	0.004565	2,20	-0.00027	0,51961	0,00000	0,25	1,25	C_s
LiPPLi	1,9448	1,9279	1,9448	179,999	180,000	-0.218878	0.218878	0.218878	-0.218878	0,98	0,54624	0,43425	0,54624	1,45	2,45	$D_{\sim h}$
BePPBe	1,6228	2,0509	1,6228	179,999	179,999	-0.159206	0.159205	0.159206	-0.159206	1,57	0,84585	0,33658	0,84585	1,05	2,05	$D_{\sim h}$
BPPB	1,5427	11,8060	1,5427	179,985	179,995	-0.152788	0.152788	0.152788	-0.152788	2,04	0,64612	0,00000	0,64612	0,85	1,85	$D_{\sim h}$
CPPC	1,5473	2,0867	1,5473	179,999	179,999	-0.153234	0.153234	0.153235	-0.153234	2,55	0,53806	0,25923	0,53806	0,70	1,70	$D_{\sim h}$
NPPN	1,4588	53,9780	1,4587	179,994	179,994	-0.438107	0.438107	0.438118	-0.438118	3,04	0,52746	0,00000	0,52748	0,65	1,65	$D_{\sim h}$
OPPO	1,5177	2,2524	1,5177	99,6812	99,6865	-0.380723	0.380724	0.380720	-0.380720	3,44	0,30302	0,17785	0,30303	0,60	1,60	C_{2h}
FPPF	1,6441	1,9776	1,6441	179,999	179,999	-0.322604	0.322688	0.322545	-0.322629	3,98	0,11543	-0,07245	0,11542	0,50	1,50	$D_{\sim h}$
NaPPNa	2,2181	1,9473	2,2181	179,999	179,999	0.650821	-0.650822	-0.650821	0.650821	0,93	0,20578	0,35392	0,20578	1,80	2,80	$D_{\sim h}$
MgPPMg	2,3912	1,9250	2,3913	107,434	107,433	0.270618	-0.270610	-0.270596	0.270588	1,31	0,12712	0,37810	0,12710	1,50	2,50	C_2
AlPPAl	2,1561	1,9308	2,1561	179,947	179,947	0.369608	-0.369608	-0.369608	0.369607	1,61	0,20006	0,36596	0,20006	1,25	2,25	$D_{\sim h}$
SiPPSi	1,8659	2,0537	1,8659	180,000	180,000	0.220041	-0.220042	-0.220042	0.220041	1,90	0,45592	0,28925	0,45592	1,10	2,10	$D_{\sim h}$
PPPP	1,9179	1,8946	1,9179	180,000	180,000	0.052622	-0.052623	-0.052622	0.052623	2,19	0,30836	0,4212	0,30836	1,00	2,00	$D_{\sim h}$
SPPS	2,0175	1,8035	2,0175	180,000	179,999	-0.160639	0.160635	0.160640	-0.160639	2,58	0,16763	0,54535	0,16765	1,00	2,00	$D_{\sim h}$
ClPPCl	2,0863	14,7810	2,0863	143,240	166,801	-0.373484	0.373484	0.373501	-0.373503	3,16	0,13537	0,00000	0,13536	1,00	2,00	C_1

EN_n : Elektronegativitas atom n

EN_p : Elektronegativitas atom fosfor = 2,19

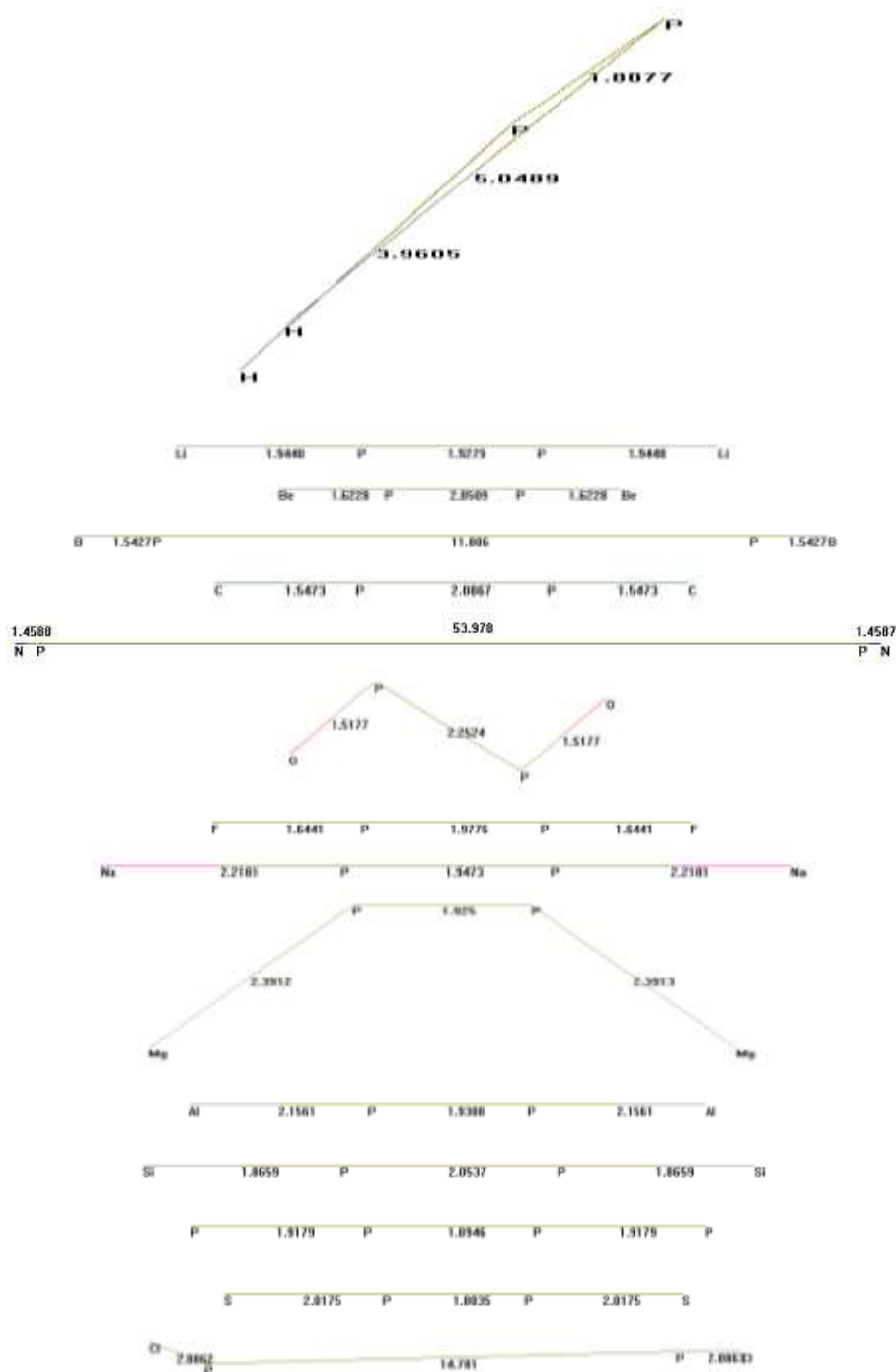
r_p : jari-jari atom fosfor: 1,00

r_n : jari-jari atom n

n: unsur-unsur periode 1-3 kecuali unsur-unsur gas mulia

Geo:Geometri

Kekuatan ikatan total berdasarkan elektron valensi

Gambar 3 Hasil Optimasi Molekul n_2P_2 Grup Simetri $D_{\infty h}$

Dari Gambar 3 terlihat bahwa, kecuali untuk molekul OPPO dan molekul MgPPMg, secara umum struktur hasil optimasi yang diperoleh adalah berbentuk linear dengan grup

simetri $D_{\infty h}$. Sedangkan untuk molekul OPPO diperoleh struktur optimasi dengan grup simetri C_{2h} dan untuk molekul MgPPMg diperoleh struktur optimasi dengan grup simetri C_2 . Per-

bedaan struktur optimasi untuk molekul OPPO dan MgPPMg ini disebabkan karena molekul-molekul ini berusaha mencari bentuk-bentuk struktur yang paling stabil dalam ruang. Selain itu, dalam Gambar 3 juga terlihat, ikatan H-P (H1-P2 dan P3-H4) pada HPPH dan ikatan P-P (P2-P3) pada ClPPCl telah putus, sehingga dapat dikatakan molekul HPPH dan molekul ClPPCl tidak terbentuk. Putusnya ikatan, juga didapatkan pada molekul BPPB dan NPPN. Sehingga molekul BPPB dan NPPN juga tidak terbentuk.

Kuat Ikatan dan Struktur Lewis dari Struktur-Struktur Hasil Optimasi Molekul n_2P_2 Grup Simetri $D_{\sim h}$

Kuat ikatan dipengaruhi oleh orbital atom. Orbital-orbital dengan overlapping lebih besar akan memberikan ikatan yang lebih kuat. Pada molekul n_2P_2 , dengan n adalah unsur-unsur periode 1-3 kecuali unsur-unsur gas mulia, or-

bital-orbital yang digunakan untuk membentuk ikatan berasal dari orbital s, P_x , P_y dan P_z , sehingga ikatan yang terbentuk adalah ikatan sigma dan ikatan phi. Jadi dalam bahasan ini, yang dikaji adalah ikatan sigma dan ikatan phi yang terbentuk dari overlapping orbital s, P_x , P_y dan P_z dari elektron-elektron valensi molekul-molekul n_2P_2 hasil optimasi.

Kuat ikatan dan jenis ikatan struktur-struktur teroptimasi molekul n_2P_2 grup simetri $D_{\sim h}$, dimana n adalah unsur-unsur periode 1-3, kecuali unsur-unsur gas mulia, diringkaskan dalam Tabel 2. Dari analisa kuat ikatan ini, dapat diramalkan ikatan-ikatan yang terjadi dalam molekul teroptimasi n_2P_2 grup simetri $D_{\sim h}$ dan dapat dimanfaatkan dalam menggambarkan struktur-struktur Lewisnya. Struktur Lewis molekul teroptimasi n_2P_2 grup simetri $D_{\sim h}$ dapat dilihat dalam Gambar 4.

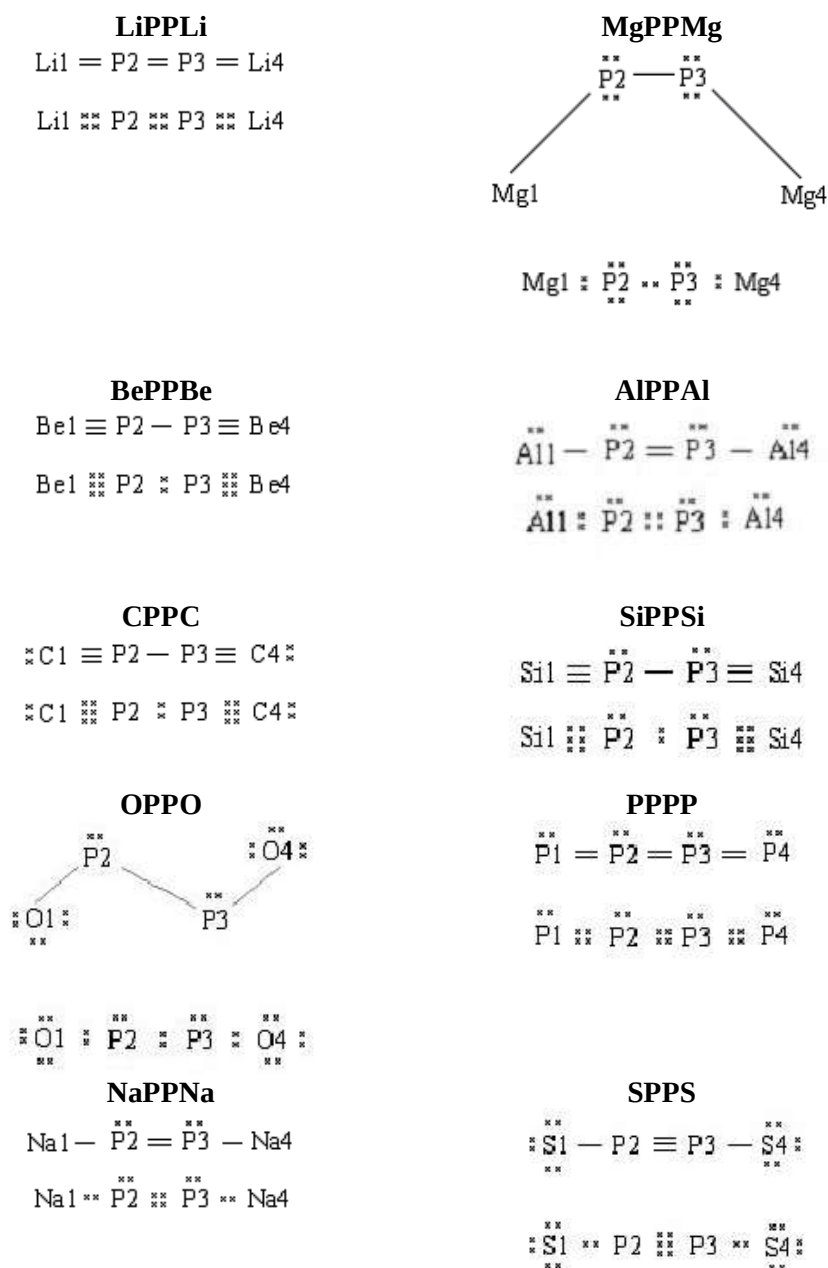
Tabel 2 Kuat Ikatan dan Jenis Ikatan Struktur-Struktur Teroptimasi Molekul n_2P_2 Grup Simetri $D_{\sim h}$. n adalah Unsur-Unsur Periode 1-3, Kecuali Unsur-Unsur Gas Mulia

n	Kuat Ikatan		
	n_1-P_2	P_2-P_3	P_3-n_4
(1)	(2)	(3)	(4)
H	$\sigma = -0,00027$	$\sigma = 0,37234$	$\sigma = 0,00000$
	Total = -0,00027	$\pi_z = 0,14727$	Total = 0,00000
	$\sigma = 0,31997$	Total = 0,51961	$\sigma = 0,31997$
Li	$\pi_y = 0,17331$	$\pi_y = 0,02201$	$\pi_y = 0,17331$
	$\pi_z = 0,05296$	$\pi_z = 0,10947$	$\pi_z = 0,05296$
	Total = 0,54624	Total = 0,43425	Total = 0,54624
Be	$\sigma = 0,41443$	$\sigma = 0,30952$	$\sigma = 0,41443$
	$\pi_y = 0,21571$	$\pi_y = 0,01353$	$\pi_y = 0,21571$
	$\pi_z = 0,21571$	$\pi_z = 0,01353$	$\pi_z = 0,21571$
B	Total = 0,84585	Total = 0,33658	Total = 0,84585
	$\sigma = 0,23436$	$\sigma = 0,00000$	$\sigma = 0,23436$
	$\pi_y = 0,20588$	$\pi_y = 0,00000$	$\pi_y = 0,20588$
C	$\pi_z = 0,20588$	$\pi_z = 0,00000$	$\pi_z = 0,20588$
	Total = 0,64612	Total = 0,00000	Total = 0,64612
	$\sigma = 0,20488$	$\sigma = 0,24283$	$\sigma = 0,20488$
	$\pi_y = 0,16659$	$\pi_y = 0,00820$	$\pi_y = 0,16659$
	$\pi_z = 0,16659$	$\pi_z = 0,00820$	$\pi_z = 0,16659$
	Total = 0,53806	Total = 0,25923	Total = 0,53806

lanjutan tabel 2 kuat ikatan.....

(1)	(2)	(3)	(4)
	$\sigma = 0,20488$	$\sigma = 0,24283$	$\sigma = 0,20488$
C	$\pi_y = 0,16659$	$\pi_y = 0,00820$	$\pi_y = 0,16659$
	$\pi_z = 0,16659$	$\pi_z = 0,00820$	$\pi_z = 0,16659$
	Total = 0,53806	Total = 0,25923	Total = 0,53806
	$\sigma = 0,17872$	$\sigma = 0,00000$	$\sigma = 0,17872$
N	$\pi_y = 0,17437$	$\pi_y = 0,00000$	$\pi_y = 0,17438$
	$\pi_z = 0,17437$	$\pi_z = 0,00000$	$\pi_z = 0,17438$
	Total = 0,52746	Total = 0,00000	Total = 0,52748
O	$\sigma = 0,30302$	$\sigma = 0,17785$	$\sigma = 0,30303$
	Total = 0,30302	Total = 0,17785	Total = 0,30303
	$\sigma = 0,08921$	$\sigma = -0,30457$	$\sigma = 0,08920$
F	$\pi_y = 0,01311$	$\pi_y = 0,11606$	$\pi_y = 0,01311$
	$\pi_z = 0,01311$	$\pi_z = 0,11606$	$\pi_z = 0,01311$
	Total = 0,11543	Total = -0,07245	Total = 0,11542
	$\sigma = 0,17156$	$\sigma = 0,26391$	$\sigma = 0,17156$
Na	$\pi_y = 0,00791$	$\pi_y = 0,12162$	$\pi_y = 0,00791$
	$\pi_z = 0,02631$	$\pi_z = -0,03161$	$\pi_z = 0,02631$
	Total = 0,20578	Total = 0,35392	Total = 0,20578
	$\sigma = 0,12712$	$\sigma = 0,29503$	$\sigma = 0,12710$
Mg	Total = 0,12712	Jly = 0,08307	Total = 0,12710
	$\sigma = 0,11680$	Total = 0,37810	$\sigma = 0,11680$
		$\sigma = 0,25442$	
Al	$\pi_y = 0,02875$	$\pi_y = 0,09126$	$\pi_y = 0,02875$
	$\pi_z = 0,05451$	$\pi_z = 0,02028$	$\pi_z = 0,05451$
	Total = 0,20006	Total = 0,36596	Total = 0,20006
	$\sigma = 0,16642$	$\sigma = 0,26547$	$\sigma = 0,16642$
Si	$\pi_y = 0,14475$	$\pi_y = 0,01189$	$\pi_y = 0,14475$
	$\pi_z = 0,14475$	$\pi_z = 0,01189$	$\pi_z = 0,14475$
	Total = 0,45592	Total = 0,28925	Total = 0,45592
	$\sigma = 0,15447$	$\sigma = 0,28991$	$\sigma = 0,15447$
P	$\pi_y = 0,04218$	$\pi_y = 0,10550$	$\pi_y = 0,04218$
	$\pi_z = 0,11171$	$\pi_z = 0,02579$	$\pi_z = 0,11171$
	Total = 0,30836	Total = 0,42120	Total = 0,30836
	$\sigma = 0,11187$	$\sigma = 0,27689$	$\sigma = 0,11187$
S	$\pi_y = 0,02788$	$\pi_y = 0,13423$	$\pi_y = 0,02789$
	$\pi_z = 0,02788$	$\pi_z = 0,13423$	$\pi_z = 0,02789$
	Total = 0,16763	Total = 0,54535	Total = 0,16765
	$\sigma = 0,13272$	$\sigma = 0,00000$	$\sigma = 0,12603$
Cl	$\pi_y = 0,00401$	$\pi_y = 0,00000$	$\pi_y = 0,00093$
	$\pi_z = -0,00136$	$\pi_z = 0,00000$	$\pi_z = 0,00840$
	Total = 0,13537	Total = 0,00000	Total = 0,13536

Keterangan: Tulisan yang bercetak tebal yang dipakai untuk menentukan kuat dan jenis ikatan. Sedangkan tulisan yang tidak bercetak tebal diabaikan, sebab sesuai dengan aturan standar, untuk nilai yang kecil dari 0,09 diabaikan.



Gambar 4 Struktur Lewis Molekul Teroptimasi n_2P_2 Grup Simetri $D_{\infty h}$

Berdasarkan analisis yang dilakukan, didapatkan kesimpulan seperti yang akan diungkapkan di bawah ini. Ikatan $n1-P2$ atau ikatan $P3-n4$, dengan n adalah unsur-unsur periode 1-3 kecuali unsur-unsur gas mulia, dapat berupa ikatan tunggal, ikatan rangkap dua ataupun ikatan rangkap tiga. Dan ikatan $P2-P3$ juga berupa ikatan tunggal, ikatan rangkap dua, dan

ikatan rangkap tiga. Kuat ikatan dan panjang ikatan ditentukan dari jenis ikatan yang digunakan. Ikatan tunggal dihasilkan oleh satu ikatan σ , ikatan rangkap dua dihasilkan oleh satu ikatan σ dan satu ikatan π , sedangkan ikatan rangkap tiga dihasilkan oleh satu ikatan σ dan dua ikatan π , dimana untuk struktur ter-

optimasi molekul n_2P_2 grup simetri $D_{\infty h}$ ini, ikatan π dihasilkan oleh adanya overlapping orbital $\pi_y - \pi_y$ atau orbital $\pi_z - \pi_z$. Ikatan $n1-P2$ atau ikatan $p3-n4$ tunggal terjadi dalam struktur teroptimasi molekul-molekul OPPO, FPPF (tetapi ikatan $P2-P3$ dalam FPPF putus), NaPPNa, MgPPMg, AlPPAl, SPPS dan ClPPCl (tetapi ikatan $P2-P3$ dalam ClPPCl putus); ikatan $n1-P2$ atau ikatan $p3-n4$ rangkap dua terjadi dalam struktur teroptimasi molekul LiPPLi dan PPPP; ikatan $n1-P2$ atau ikatan $p3-n4$ rangkap tiga terjadi dalam struktur teroptimasi molekul-molekul BePPBe, BPPB (tetapi ikatan $P2-P3$ dalam BPPB putus), CPPC, NPPN (tetapi ikatan $P2-P3$ dalam NPPN putus) dan SiPPSi. Ikatan $P2-P3$ tunggal terjadi dalam struktur teroptimasi molekul-molekul BePPBe, CPPC, OPPO, MgPPMg, dan SiPPSi; ikatan $P2-P3$ rangkap dua terjadi dalam struktur teroptimasi molekul HPPH (tetapi ikatan $H1-P2$ dan $P3-H4$ dalam HPPH putus), LiPPLi, NaPPNa, AlPPAl dan PPPP; ikatan $P2-P3$ rangkap tiga terjadi dalam struktur teroptimasi molekul SPPS.

Seperti diungkapkan di atas, ikatan $H1-P2$ dan $P3-H4$ dalam struktur teroptimasi molekul HPPH, dan ikatan $P2-P3$ dalam struktur teroptimasi BPPB, NPPN, dan ClPPCl telah putus. Putusnya ikatan $P2-P3$ dalam NPPN dan ClPPCl dapat dijelaskan sebagai berikut. Unsur N satu golongan dengan unsur P, yaitu golongan VA, sedangkan unsur Cl satu periode dengan P, yaitu periode 3. Dalam golongan VA, elektronegativitas atom N adalah yang paling besar, dan dalam periode 3, elektronegativitas atom Cl adalah yang paling besar. Untuk NPPN, seperti disebutkan tadi, elektronegativitas atom N (3,04) lebih besar dari atom P (2,19), sehingga lebih cenderung menarik elektron ke arahnya. Selain itu, juga ditambah oleh tolakan antara sesama atom P yang menyebabkan elektron-elektron ikatan $P2-P3$ dalam NPPN lebih mudah lepas. Sedangkan pada ClPPCl, selain juga disebabkan oleh elektronegativitas atom Cl (3,16) yang lebih besar, dapat juga disebabkan oleh muatan inti Cl yang lebih besar ($[Ne]3s^23p^5$) dari atom P ($[Ne]3s^23p^3$), sehingga lebih cenderung menarik elektron ikatan ke arahnya. Serta juga ditambah oleh tolakan antara sesama atom fosfor, yang mana juga mengakibatkan putusnya ikatan $P2-P3$ dalam ClPPCl. Selanjutnya, putusnya ikatan

dalam HPPH dan BPPB juga dapat dijelaskan dari elektronegativitas unsur-unsur pembentuk molekul itu. Dimana elektronegativitas atom H (2,20) dan elektronegativitas atom B (2,04) hampir sama dengan P (2,19). Elektronegativitas yang hampir sama ini menyebabkan masing-masing unsur tersebut akan sama-sama menarik elektron ke arahnya. Akan tetapi pada molekul HPPH, faktor jari-jari atom juga harus diperhatikan. Jari-jari atom H ($0,25 \text{ \AA}$) yang jauh lebih kecil dibandingkan dengan P ($1 \text{ \AA}$) ini, sehingga ikatan yang dihasilkan lebih lemah dibanding ikatan $P2-P3$, dan menyebabkan putusnya ikatan $H1-P2$ dan $P3-H4$.

Dari penentuan kekuatan dan jenis ikatan di atas, dapat dilihat bagaimana kecenderungan untuk struktur-struktur teroptimasi molekul-molekul n_2P_2 grup simetri $D_{\infty h}$ ini:

1. Ikatan tunggal
Jenis ikatan tunggal pada ikatan $n1-P2$ atau $P3-n4$ didapatkan untuk rentang panjang ikatan $n1-P2$ dan $P3-n4$ antara $1,5177 \text{ \AA}$ sampai $2,3913 \text{ \AA}$. Sedangkan jenis ikatan tunggal pada ikatan $P2-P3$ didapatkan untuk rentang panjang ikatan $P2-P3$ antara $1,9250 \text{ \AA}$ sampai $2,2524 \text{ \AA}$.
2. Ikatan rangkap dua
Jenis ikatan rangkap dua pada ikatan $n1-P2$ atau $P3-n4$ didapatkan untuk rentang panjang ikatan $n1-P2$ dan $P3-n4$ antara $1,9179 \text{ \AA}$ sampai $1,9448 \text{ \AA}$. Sedangkan jenis ikatan rangkap dua pada ikatan $P2-P3$ didapatkan untuk rentang panjang ikatan $P2-P3$ antara $1,8077 \text{ \AA}$ sampai $1,9776 \text{ \AA}$.
3. Ikatan rangkap tiga
Jenis ikatan rangkap tiga pada ikatan $n1-P2$ atau $P3-n4$ didapatkan untuk rentang panjang ikatan $n1-P2$ dan $P3-n4$ antara $1,4588 \text{ \AA}$ sampai $1,8659 \text{ \AA}$. Sedangkan jenis ikatan rangkap dua pada ikatan $P2-P3$ hanya didapatkan untuk panjang ikatan $P2-P3$ adalah $1,8035 \text{ \AA}$.

Energi Total dari Struktur-Struktur Hasil Optimasi Molekul n_2P_2 Grup Simetri $D_{\infty h}$

Kecendrungan energi total yang terjadi dalam molekul n_2P_2 teroptimasi sebagai akibat dari variasi unsur-unsur yang digunakan pada ujung-ujung rantai linear, diperlihatkan dalam Gambar 5. Energi total yang dihasilkan seluruhnya bernilai negatif, dengan nilai negatif paling besar terdapat pada molekul ClP ($E = -993242,9375$), yakni hasil optimasi dari molekul ClPPCl, sedangkan nilai negatif paling kecil terdapat pada molekul PP ($E =$

$-423494,6563$), yakni hasil optimasi dari molekul HPPH. Sehingga dapat disimpulkan, dalam satu golongan, dari atas ke bawah, nilai negatif dari energi total semakin besar (energi total semakin kecil). Sama halnya untuk satu golongan, dalam satu periode dari kiri ke kanan, harga negatif energi totalnya juga semakin besar (energi total semakin kecil). Jadi, dalam satu golongan dari atas ke bawah dan dalam satu periode dari kiri ke kanan molekul semakin stabil.

Tabel 4 Energi-Energi Total Geometri Teroptimasi Molekul Heteroatom n_2P_2 Grup Simetri $D_{\infty h}$, n Adalah Unsur-Unsur Perioda 1-3 Kecuali Unsur-Unsur Gas Mulia

IA						
H						
-423494,6563	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Li	Be	B	C	N	O	F
-432013,5938	-440788,1250	-453103,6875	-469491,9688	-490202,3750	-515423,9688	-545702,7500
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
-623275,7500	-670064,4375	-722643,3125	-781128,1250	-845469,6250	-916130,4375	-993242,9375

KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, dapat diambil kesimpulan sebagai berikut. Struktur teroptimasi molekul n_2P_2 linear (molekul n_2P_2 grup simetri $D_{\infty h}$), ikatan n_1-P_2 atau ikatan P_3-n_4 dan ikatan P_2-P_3 dapat berupa ikatan tunggal, ikatan rangkap dua ataupun ikatan rangkap tiga. Ikatan tunggal dihasilkan oleh satu ikatan σ , ikatan rangkap dua dihasilkan oleh satu ikatan σ dan satu ikatan π , sedangkan ikatan rangkap tiga dihasilkan oleh satu ikatan σ dan dua ikatan π . Dimana, ikatan π dihasilkan oleh adanya overlapping orbital $\pi_y - \pi_y$ atau orbital $\pi_z - \pi_z$.

Untuk hasil optimasi n_2P_2 linear, molekul yang paling stabil adalah ClP ($E = -993242,9375$), yakni hasil optimasi dari molekul ClPPCl. Dan molekul yang paling tidak stabil adalah PP ($E = -423494,6563$), yakni hasil optimasi dari molekul HPPH. Dalam satu golongan dari atas ke bawah atau dalam satu periode dari kiri ke kanan, energi total semakin berkurang, atau molekul n_2P_2 semakin stabil.

DAFTAR KEPUSTAKAAN

- Allinger N. 1996. *Hyper Chem Release 5.0 For Windows Reference Manual*, p. 1-3, 204-211. Hypercube, Inc., Canada.
- Chuchev K and BelBruno JJ. 2003. *J. Phys. Chem. A*, 107(50), p. 11217-11222.
- Chuchev K and BelBruno JJ. 2004. *J. Phys. Chem. A*, 108(24), p. 5226-5233.
- Li ZH and Fan KN. 2002. *J. Phys. Chem. A*, 106(28), p. 6659-6664.
- Hehre WJ, Radom L, Schleyer PR and Pople JA., 1986. *Ab Initio Molecular Orbital Theory*. p. 5-9. John Wiley & Sons, New York.
- Kusuma ST. 2005. *Komputasi Sebagai Penyokong Penelitian Kimia*, h. 7-12. FMIPA, Universitas Andalas, Padang.
- Levine IN. 2000. *Quantum Chemistry*, fifth edition, p. 480-481. Prentice Hall International, Inc., New York.
- Matxain JM, Ugalde JM, Towler MD and Needs RJ. 2003. *J. Phys. Chem. A*, 107(46), p. 10004-10010.
- Ornellas FR and Iwata S. 1996. *J. Phys. Chem*, 100(40), p. 16155-16161.

- Ornellas FR and Iwata S. 1996. *J. Phys. Chem*, 100(26), p. 10919-10927.
- Pascoli G and Lavendy H. 1999. *J. Phys. Chem. A*, 103(18), p.3518-3524.
- Pranowo HD. 2000. *Pelatihan Kimia Komputasi Dosen IBT: Metoda Ab Initio dalam Kimia Komputasi*, h. 1-2, 11-13. Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
- Somasundram K and Handy NC. 1996. *J. Phys. Chem*, 100(44), p. 17485-17489.
- Wijaya K dan Pranowo HD. 2000. *Pelatihan Kimia Komputasi: Program Kimia HyperChem*, h. 37-41. Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
- Zhan CG and Iwata S. 1997. *J. Phys. Chem*, 101(4), p. 591-596.