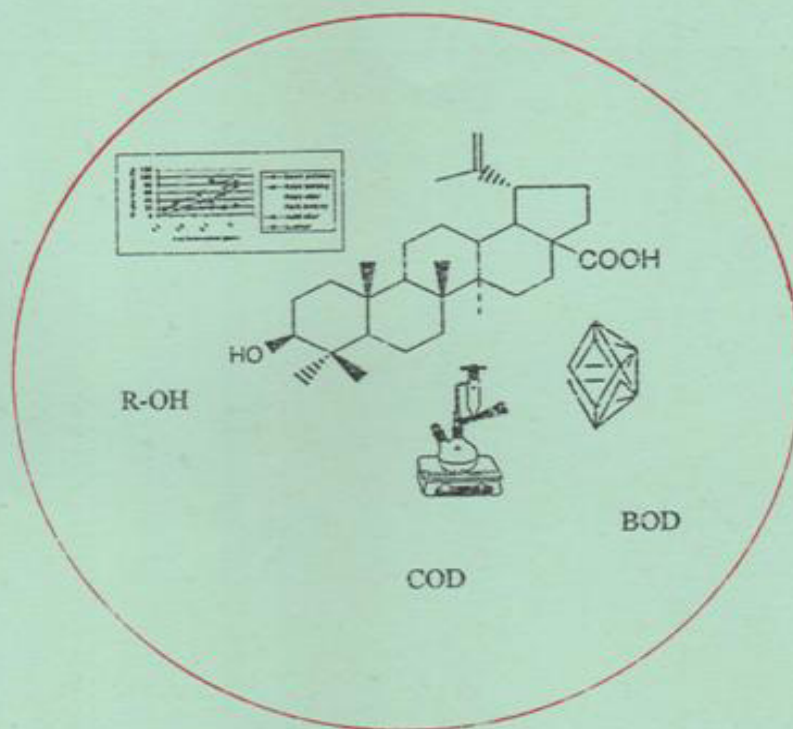


Volume 8 Nomor 2 Desember 2007

ISSN 1411-6507

CHEMICA

Jurnal Ilmiah Kimia dan Pendidikan Kimia



Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Makassar
2007

CHEMICA

ISSN 1411-6502

Jurnal Tengah Tahunan : Juni - Desember

CHEMICA adalah jurnal yang memuat informasi ilmiah bidang kimia dan pendidikan kimia berupa hasil penelitian, telaah pustaka, opini, makalah teknis, dan kajian buku.

Ketua Dewan Penyunting
Dr.rer.nat.H.Muharram,M.Si

Dewan Penelaah:

Prof. Dr. Ir. T. Harlim (UNHAS)
Dr.rer.nat.H.Ahmad Mudzakir,M.Si.(UPI)
Dr. H. Tabrani Gani, M.Pd. (UNM)
Dr. Sudding, M.S (UNM)
Dr.rer.nat.H.Asrial,M.Si.(UNJA)
Drs.H.Muhammad Yudi,M.Si.(UNM)
Drs.Alimin, MS. (UNM)
Dr.rer.nat.H.A. Zaeni,M.Si. (UNHALU)

Dewan Penyunting :

Muhammad Syahrir, S.Pd.,M.Si.
Drs. Darminto, M.Si.
Drs. H. Muh. Yunus, M.Si.
Dra.Hj.Army Auliah,M.Si.
Dra. Ramlawati, M.Si.
Iwan Dini, S.Si., M.Si.
Jusniar, S.Pd., M.Pd.

CHEMICA diterbitkan oleh Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Makassar (UNM)

Alamat Redaksi dan Penerbit
Jurusan Kimia, Fakultas MIPA UNM
Jl. Dg Tata Parangtambung, Makassar 90224
Telp. 0411-840295; email : chemica@unm.ac.id

Tahun pertama terbit: 2000

CHEMICA

Volume 8 Nomor 2 Desember 2007

ISSN 1411-6502

Jurnal Tengah Tahunan : Juni – Desember

DAFTAR ISI

No.	Judul	Halaman
1.	Keberdayaan Ibu Rumah Tangga dalam Perlindungan dan Keamanan Makanan Jajanan Tradisional di Tingkat Keluarga Kab.Gowa <i>Muhammad Damial & Ramdani</i>	1 - 8
2.	Menggambarkan Jenis-jenis Ikatan dengan Model-Model Densitas Elektron <i>Dominggus Tahya & Muh. Tawil</i>	9 - 17
3.	Model Kurikulum Integrated pada Mata Pelajaran Kimia <i>Bertha Yonata</i>	18 - 24
4.	Upaya Penanggulangan Penyalahgunaan NAPZA serta Efeknya Terhadap Kesehatan <i>Muhammad Syahrir</i>	25 - 35
5.	Analisis Timbal (Pb) dalam Rambut Operator SPBU di Makassar <i>Tinggi Banggali</i>	36 - 41
6.	Sanitasi Lingkungan pada Industri Mebel di Kec. Manggala Kota Makassar <i>Pirdaus Daud</i>	42 - 56
7.	Isolasi Steroid dari Siput Bakau (<i>Terebralia sulcata</i>) <i>Darminto & Iwan Dini</i>	57 - 60
8.	Pengaruh Pendekatan Starter Eksperimen dengan Setting Kooperatif terhadap Pemahaman Konsep IPA Siswa SMP Negeri I Bontotiro <i>Jusniar</i>	60 - 67
9.	Skrining Bioaktivitas Jaringan Tumbuhan Paliasa (<i>Kleinhovia hospital L</i>) Asal Sulawesi Selatan <i>Imram G, A. Noor, T.Harlim, & Nunuk H.Sukamto</i>	68 - 75
10.	Isolasi dan Identifikasi Asam Betulinat dari Ekstrak n-Heksana Tumbuhan <i>Artocarpus teysmanii</i> Miq (<i>Moraceae</i>) <i>Muharram & Kasman</i>	76 - 82

Keterangan sampul : KLT, Tabel Grafik Letalitas, Parameter Pencemaran, Narkotika, Alat destilasi

MENGGAMBARKAN JENIS-JENIS IKATAN DENGAN MODEL-MODEL DENSITAS ELEKTRON

Dominggus Tahya* & Muh. Tawil**

*Dosen Kimia FKIP Universitas Pattimura (UNPATI) Ambon

** Dosen Fisika FMIPA UNM

ABSTRAK

Penerapan konsep gambaran densitas elektron memberikan wawasan yang lebih baik ke sifat setiap jenis ikatan. Gambaran densitas elektron juga termasuk penggambaran yang lebih intuitif untuk kekuatan ikatan dalam sistem kovalen murni dan sistem ionik, dan metode penggolongan ikatan yang lebih tepat dalam sistem-sistem kovalen polar.

Kata Kunci : *Densitas Elektron, kovalen, ionik, kovalen polar*

ABSTRACT

Applying illustration electron density concept give better knowledge to nature of every kind of bonding. Illustration electron density also inclusive to more intuitive description for the strength of real bonding in covalent and ionic system, and more precise bonding classification method in system of covalent polar

Keywords : Electron density , covalent, ionic, covalent polar

PENDAHULUAN

Konsep ikatan kimia paling berguna, dan merupakan salah satu bagian yang paling sulit dimengerti dalam ilmu kimia (Brown, D., 2002). Memahami struktur dan kecocokan pada ikatan dapat memungkinkan kita memprediksi sifat-sifat senyawa dan membawa kepada pengembangan bahan-bahan, misalnya polimer-polimer baru, teknologi-teknologi maju lain seperti film-film, serat-serat sintesis dan darah buatan. Pentingnya konsep ini diakui oleh Van Arkel (Arkel, A.E.V., 1956) yang menggolongkan suatu ikatan sebagai satu dari tiga jenis ikatan (kovalen murni, kovalen polar, dan ionik). Suatu ikatan kovalen murni menunjukkan densitas elektron yang sama antara kedua atom yang berikatan dengan tak adanya momen dipole bersih (Hehre, W.J., 2003). Suatu ikatan kovalen polar menunjukkan perubahan pada densitas elektron yang berikatan dan memiliki sebuah momen dipole bersih. Pada ikatan ionik spektrum ikatan antara kedua inti ikatan, dalam hal ini, momen dipole terbesar diharapkan.

Kajian Pustaka

Deskripsi modern jenis-jenis ikatan didasarkan pada elektronegativitas relatif atom-atom yang terlibat dalam

ikatan. Jenis ikatan dapat diprediksi menggunakan model-model yang berbeda; yang paling umum adalah perbedaan elektronegativitas (ΔEN) Pauling dan ditemukan tepat dalam kebanyakan keadaan. Suatu pengecualian untuk ΔEN Pauling adalah molekul LiI yang diprediksi kovalen polar, tapi secara percobaan bersifat ionik.

Suatu metode alternatif telah diusulkan oleh Sproul. Menurutnya, suatu deskripsi yang lebih lengkap tentang jenis ikatan memerlukan penggunaan suatu parameter tambahan, ini adalah rata-rata elektronegativitas, $\frac{1}{2}(\chi_A + \chi_B)$, daripada hanya ΔEN . Kedua model tadi masih tidak lengkap; misalnya dalam ikatan kovalen murni H_2 atau Cl_2 , perbedaan masih ada dalam energi-energi ikatan. Jadi penggolongan ikatan yang hanya didasarkan pada elektronegativitas (ΔEN dan $\frac{1}{2}(\chi_A + \chi_B)$) tidaklah cukup. Idealnya, jenis-jenis ikatan harus ditentukan dari ukuran densitas elektron (<http://academic.reed.edu/chemistry/roco/Density/index.html>). Pada dekade yang lalu, kemajuan dalam metode percobaan dan metode teoritis memungkinkan penentuan densitas elektron atau molekul-molekul dan kristal-kristal kecil (Silberberg, M.S., 2003). Dengan

Kedatangan komputer-komputer yang tidak mahal dan software penghitungan, maka gambaran densitas elektron sekarang digunakan secara rutin dan luas untuk menggambarkan orbital, potensial elektrostatik, dan ukuran atom dan molekul (HyperChem, 2002). Dalam tulisan ini akan dijelaskan ikatan dalam berbagai senyawa biner menggunakan model-model densitas elektron; yang menunjukkan bahwa gambaran demikian dapat lebih baik dalam menentukan jenis ikatan dibandingkan dengan gambaran elektronegativitas relatif seperti peta elektronegativitas ΔEN Pauling.

METODE DAN PROSEDUR

Gambaran densitas elektron H_2 , Cl_2 , Br_2 , FI , dan Lil masing-masing menunjukkan isosurface (keadaan permukaan yang sama) pada $0,08 a_u$ dan dihitung pada tingkat Hartree-Fock menggunakan rangkaian dasar 3-21G* dalam program *Spartan '04*. Gambaran densitas elektron untuk KCl dan $RbCl$ dihitung pada tingkat teori yang sama dengan menggunakan rangkaian dasar yang sama dalam *HyperChem 7.5 Student's Edition*. Optimalisasi geometri dilakukan pada semua senyawa sebelum perhitungan densitas elektron.

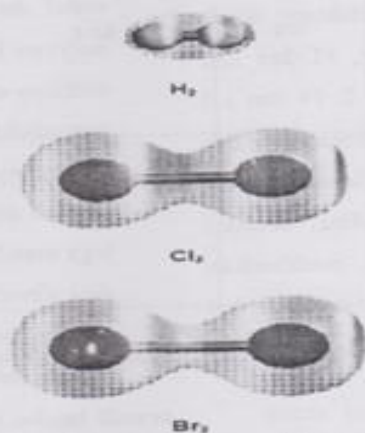
HASIL DAN PEMBAHASAN

1. Kovalen Murni




Gambaran densitas elektron yang dihitung untuk serangkaian molekul (H_2 , Cl_2 dan Br_2) dengan ikatan-ikatan kovalen murni ditunjukkan dalam Gambar 1. Semua molekul menunjukkan distribusi simetris densitas elektron antara atom-atom yang berikatan. Untuk H_2 densitas elektron terbesar ditempatkan antara atom-atom yang berikatan sedangkan jenis-jenis diatomik dalam grup halogen menunjukkan suatu tempat yang menurun/pinggang (*dip/waist*) yang jelas, atau kuantitas elektron-elektron yang lebih rendah antara atom-atom yang berikatan.

Suatu ikatan kovalen murni adalah ikatan yang memiliki ΔEN sebesar 0; meskipun ini benar, ada beberapa perbedaan dalam pernyataan luas saat menunjuk kepada energi-energi ikatan percobaan yang berbeda dari setiap molekul (Tabel 1). Kajian literatur kami menunjukkan bahwa densitas elektron yang berikatan untuk H_2 , Cl_2 dan Br_2 berbeda-beda dengan meningkatnya jari-jari atom dari H ke Br yang mencerminkan derajat kovalensi murni yang berbeda. Kurangnya *dip/waist* di daerah ikatan H_2 (jari-jari atom 37 pm), berbeda dengan *dip/waist* yang dirumuskan dengan baik

dalam Br-Br (jari-jari atom 114 pm), adalah akibat dari jari-jari atom yang meningkat. Ini diharapkan menempatkan elektron-elektron yang berikatan lebih lanjut dari inti mengurangi daya tarik. Ini juga yang menyebabkan kurangnya densitas elektron sepanjang sumbu ikatan yang menyebabkan ikatan yang lebih panjang dan lebih lemah. Gambaran densitas elektron berkorelasi dengan kecenderungan ini seperti pada Gambar 1. Tabel 1 juga diberikan untuk membandingkan data percobaan molekul-molekul di dalam ΔEN yang sama.



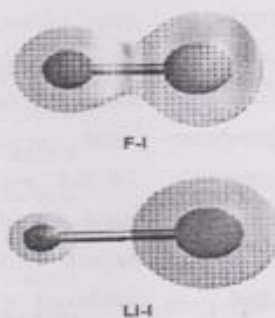
Gambar 1. Kovelan Murni : Keseluruhan model dinyatakan secara berskala untuk menggambarkan ukuran relatif mereka yang sebenarnya dan dihitung menggunakan rangkaian dasar 3-21 G* pada tingkat Hartree-Fock dan pada densitas elektron isosurface sebesar 0,08 a.u. Semua model ditunjukkan dengan $\Delta EN = 0$

Molecule	ΔEN	Dipole Moment (Debye)	Bond Energy (kJ/mol)	Atomic Radii	Bond Length (pm)	Density Model
H ₂	0	0	436	37	74	
Cl ₂	0	0	243	99	199	
Br ₂	0	0	193	114	288	

2. Kovalen Polar

Gambaran densitas elektron untuk dua molekul kovalen polar, FI dan LiI; ditunjukkan dalam Gambar 2. FI dan LiI memiliki ΔEN yang sama sebesar 1,5 dan digolongkan hanya sebagai ikatan kovalen polar menurut prediksi Pauling; densitas elektron dua senyawa ini memberikan gambaran yang sangat berbeda dalam hal sifat-sifat ikatan. Dalam LiI, kurangnya

densitas elektron di daerah ikatan adalah wakil dari situasi ikatan ion, sedangkan senyawa FI menunjukkan berbagi asimetris elektron-elektron antara inti ikatan yang menunjukkan suatu ikatan kovalen polar. Selanjutnya, perbedaan dalam momen-momen dipole dan energi ikatan (Tabel 2) juga mendukung prediksi densitas elektron dari Gambar 2, yang menyimpulkan FI sebagai senyawa kovalen polar dan LiI sebagai ionik.



Gambar 2. Kovalen Polar : Secara keseluruhan kedua model berskala untuk menggambarkan ukuran relatif mereka yang sebenarnya, dan dihitung menggunakan rangkaian dasar 3-21 G* pada tingkat Hartree-Fock dan pada densitas elektron isosurface sebesar 0,08 a.u. Kedua model ditunjukkan dengan $\Delta EN = 1,5$.

Molecule	ΔEN	Dipole Moment (Debye)	Bond Energy (kJ/mol)	Density Model
F-I	1,5	2,20	263	
Li-I	1,5	7,56	354	

yang meliputi interaksi orbital. Energi valensi 2p (≈ -15 hartrees) orbital fluorin dan valensi 5p (≈ -20 hartrees) orbital iodin dapat dibandingkan besarnya, dan

diharapkan berinteraksi menguntungkan untuk membentuk ikatan kovalen dalam FI. Karena orbital atom fluorine lebih rendah energinya, orbital molekuler ikatan

yang berisi pasangan elektron akan menjadi seperti fluorine, yang menghasilkan muatan yang sedikit negatif di sekitar inti fluorin. LiI di sisi lain benar-benar berbeda. Energi $2s$ (≈ -5 hartrees) orbital valensi lithium dan $5p$ (≈ -20 hartrees) orbital iodin berbeda pada dasarnya dan jadi pembentukan ikatan kovalen antara orbital-orbital ini berkurang. Orbital molekul ikatan menjadi lebih seperti-iodin dan pasangan elektron akan terletak di suatu daerah yang jauh lebih dekat ke iodin. Dalam hal LiI, energi yang tak sebanding adalah cukup besar yang pasangan elektron terletak secara eksklusif pada iodin dengan demikian menghasilkan pembentukan suatu ikatan ion. Pembeneran ini sesuai dengan pengamatan dalam gambar 2 dan Tabel 2 data percobaan; juga diberikan untuk membandingkan karakteristik kedua molekul kovalen polar.

2. Senyawa Biner Ionik

Gambaran densitas elektron kontur 2-D (dua senyawa ionik), KCl dan RbCl, ditunjukkan dalam Gambar 3. Dalam kedua hal ini, polarisasi awan elektron diamati. Kedua senyawa biner ini memiliki sebuah ΔEN sebesar 2,2 maka bersifat ionik. Klasifikasi sederhana ini tidak menjelaskan ketidaksesuaian dalam energi ikatan percobaan 427 KJ/mol untuk KCl dan 448 KJ/mol untuk RbCl saat orang akan mengharapkan keduanya menjadi identik dengan adanya asumsi yang jelas bahwa ikatan-ikatan ini adalah sama. Selanjutnya panjang ikatan tak dapat digunakan untuk menjelaskan perbedaan ini kalau bergantung pada ukuran ion-ion.

Untuk memahami lebih baik pengamatan ini orang harus memperhatikan pembentukan ikatan kovalen dalam senyawa ionik (kovalensi). Awan elektron antar inti dalam KCl menunjukkan penyimpangan lebih besar yang menggambarkan derajat ikatan kovalen lebih besar; sedangkan penyimpangan ke derajat yang kurang teramati dalam RbCl menunjukkan karakter kovalen yang lebih kecil. Karakter kovalen yang lebih besar memperlemah ikatan ionik dalam KCl dengan demikian menunjukkan energi ikatan yang lebih

rendah. Sebaliknya, RbCl memiliki karakter kovalen yang lebih sedikit yang menghasilkan energi ikatan lebih tinggi.

Adanya ikatan kovalen dalam sistem-sistem ion sebelumnya telah dinyatakan dalam potensial ion. Ion K^+ memiliki potensial ion lebih besar dibandingkan dengan ion Rb^+ dengan demikian menunjukkan derajat kovalensi yang lebih besar. Tabel 3 menunjukkan

suatu pemandangan yang diperluas dari daerah antar inti. Jarak yang lebih kecil "c" dalam KCl berlawanan dengan "d" (lebih besar) dalam RbCl memberikan ukuran yang lebih kuantitatif untuk derajat penyimpangan dalam dua senyawa biner ini. Fajans mengusulkan bahwa kation dari muatan yang sama, tapi dari ukuran yang berkurang akan mempolarisasikan anion-anion ke tingkat yang lebih besar.

Hb



Cl

RbCl

K

Cl

KCl

Molecule	ΔEN	Dipole Moment (Debye)	Bond Energy (kJ/mol)	Bond Length (pm)	Ratio "c" : "d" (Unit less)	Density Model
KCl	2.2	11.65	427	267	1	
RbCl	2.2	11.93	448	279	1.2	

jenis ikatan. Gambaran densitas elektron juga termasuk penggambaran yang lebih intuitif untuk kekuatan ikatan dalam sistem kovalen murni dan sistem ionik, dan metode penggolongan ikatan yang lebih tepat dalam sistem-sistem kovalen polar.

DAFTAR PUSTAKA

- Arkel, A.E.V. (1958). *Molecules and Crystals in Inorganic Chemistry*. New York : Interscience.
- Brown, D. 2002. *The Chemical Bond in Inorganic Chemistry-The Valance Bond Model*. Oxford : Oxford Science Publications.
- Hehre, W.J. (2003). *A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculation: Wavefunction Inc: Irvine, CA.*
- <http://academic.reed.edu/chemistry/roco/Density/index.html>.

HyperChem. 2002. *Release 7 for Windows Reference Manual*. Hypercube Inc.

Silberberg, M.S. (2003). *Chemistry: Molecular Nature of Matter and Change, 3rd edn*. New York : McGraw-Hill Press.