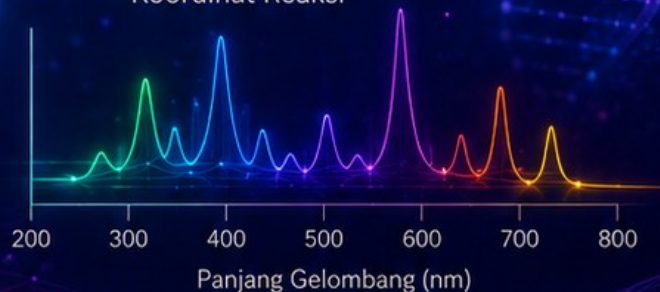
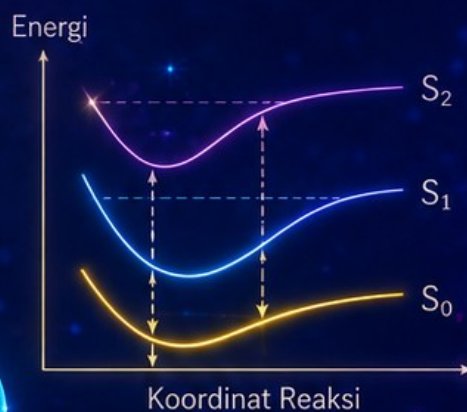
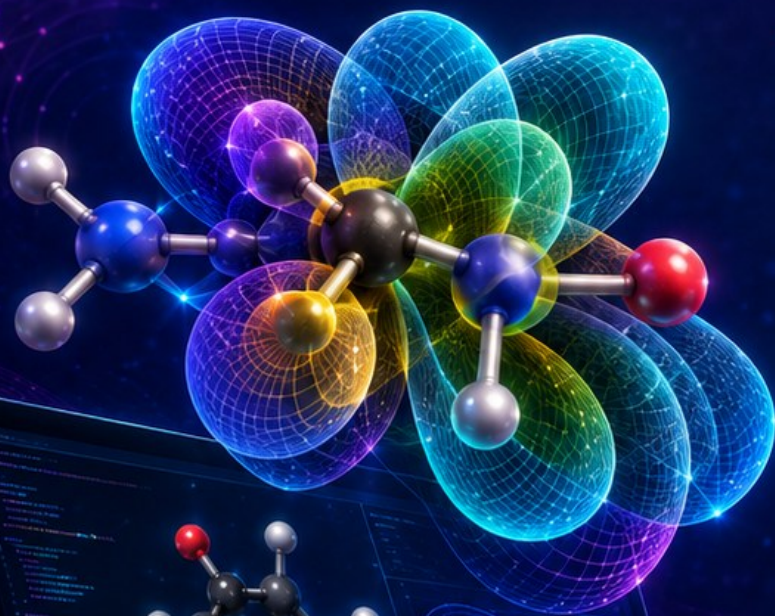


$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

PRAKTIKUM KIMIA KUANTUM

Bagian 2: Materi Praktikum



KASMUI

PRAKTIKUM KIMIA KUANTUM

BAGIAN 2: MATERI PRAKTIKUM



KATA PENGANTAR

Bagian II: Materi Praktikum Bab 4 sampai Bab 10

Puji syukur ke hadirat Allah Swt. atas limpahan rahmat, taufik, dan hidayah-Nya sehingga Bagian II buku ini, yang memuat **Materi Praktikum Bab 4 sampai Bab 10**, dapat disusun sebagai panduan pembelajaran kimia komputasi yang lebih aplikatif, sistematis, dan terarah. Bagian ini dirancang untuk menjembatani pemahaman konseptual yang telah dibangun pada bagian sebelumnya menuju keterampilan praktis dalam menjalankan, membaca, mengolah, dan menafsirkan hasil perhitungan kimia komputasi.

Bagian II ini disusun dengan semangat bahwa kimia komputasi tidak cukup dipelajari hanya sebagai teori. Kimia komputasi harus dilatih melalui praktik yang bertahap: mulai dari menyiapkan struktur molekul, memahami metode perhitungan, menjalankan optimasi geometri, membaca energi, menafsirkan orbital molekul, menganalisis momen dipol, memahami frekuensi vibrasi, menyimulasikan spektrum IR, hingga menghitung energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, dan efek pelarut. Dengan demikian, mahasiswa tidak hanya mengenal istilah-istilah komputasi, tetapi juga memperoleh pengalaman nyata dalam menghubungkan struktur molekul, metode perhitungan, output software, data numerik, grafik, dan interpretasi kimia.

Materi praktikum dalam Bab 4 sampai Bab 10 disusun secara berjenjang. Setiap bab tidak berdiri sendiri secara terpisah, melainkan membentuk alur pembelajaran yang saling berkaitan. Bab-bab awal dalam bagian ini menekankan pengenalan sistem molekul, struktur, koordinat, optimasi, dan pemilihan metode. Bab berikutnya mengarahkan mahasiswa untuk memahami bagaimana data elektronik dapat digunakan untuk menjelaskan kestabilan, reaktivitas, orbital, dan sifat molekul. Selanjutnya, pembahasan berkembang ke analisis simetri, momen dipol, frekuensi vibrasi, spektrum IR, dan akhirnya menuju analisis energi reaksi serta termodinamika molekul.

Melalui penyusunan bertahap tersebut, Bagian II diharapkan dapat membantu mahasiswa memahami bahwa hasil komputasi bukan sekadar angka yang keluar dari software. Setiap nilai energi, panjang ikatan, sudut ikatan, frekuensi, intensitas IR, momen dipol, HOMO, LUMO, entalpi, atau energi bebas Gibbs harus dibaca dalam kerangka teori kimia. Angka komputasi hanya bermakna apabila dapat dijelaskan secara ilmiah: mengapa suatu struktur lebih stabil, mengapa suatu ikatan lebih kuat, mengapa suatu mode vibrasi muncul pada bilangan gelombang tertentu, mengapa suatu spesies bermuatan lebih stabil dalam pelarut, dan mengapa energi elektronik tidak selalu sama dengan energi bebas Gibbs.

Bagian II juga menekankan pentingnya disiplin metodologis. Dalam praktikum kimia komputasi, kesalahan kecil dapat menghasilkan kesimpulan yang keliru. Kesalahan menentukan muatan, multiplicity, metode, basis set, model pelarut, koefisien stoikiometri, atau satuan energi dapat mengubah hasil analisis secara signifikan. Oleh sebab itu, setiap praktikum dalam bagian ini diarahkan agar mahasiswa terbiasa bekerja dengan prosedur yang rapi: menyiapkan input dengan benar, memvalidasi output, memeriksa konvergensi, memperhatikan frekuensi imajiner, mengelola file, menyusun tabel data, menjalankan kode Python, menyimpan CSV, membuat grafik, dan menulis analisis berbasis bukti.

Salah satu ciri penting Bagian II adalah integrasi antara software kimia komputasi dan Python. Software seperti ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, Avogadro, GaussView, atau perangkat lain digunakan untuk memperoleh data molekuler dan energi. Python digunakan untuk membantu pengolahan data, perhitungan lanjutan, visualisasi, konversi satuan, penyusunan tabel, dan penyimpanan hasil analisis. Integrasi ini penting karena pembelajaran kimia komputasi modern tidak hanya menuntut kemampuan menjalankan software, tetapi juga kemampuan mengolah data secara mandiri, transparan, dan reproduibel.

Dalam konteks pendidikan kimia, Bagian II diharapkan dapat menjadi sarana untuk memperkuat keterampilan berpikir ilmiah mahasiswa. Praktikum kimia komputasi bukan hanya latihan teknis, tetapi juga latihan berpikir kritis. Mahasiswa dilatih untuk membedakan data mentah dan kesimpulan, membedakan energi elektronik dan energi bebas Gibbs, membedakan kestabilan termodinamika dan laju reaksi, membedakan model dan realitas, serta memahami bahwa setiap hasil komputasi memiliki asumsi dan keterbatasan. Sikap kritis seperti ini sangat penting agar mahasiswa tidak menjadi pengguna software yang pasif, tetapi menjadi pembelajar kimia yang mampu menilai, menjelaskan, dan mempertanggungjawabkan hasilnya.

Bab 4 sampai Bab 10 dalam bagian ini juga dapat digunakan oleh dosen, guru, calon guru, dan mahasiswa sebagai bahan praktikum mandiri maupun terbimbing. Setiap bab disusun agar dapat dikembangkan menjadi kegiatan laboratorium komputer, tugas proyek, diskusi kelompok, laporan praktikum, atau bahan demonstrasi dalam pembelajaran kimia. Dengan pendekatan ini, kimia komputasi dapat dihadirkan secara lebih dekat dengan kebutuhan pembelajaran, baik di perguruan tinggi maupun dalam pengembangan profesional guru kimia.

Harapannya, Bagian II ini tidak hanya membantu mahasiswa memperoleh keterampilan teknis, tetapi juga menumbuhkan pemahaman bahwa kimia komputasi adalah cara berpikir. Melalui kimia komputasi, fenomena kimia dapat dianalisis dari sisi struktur, energi, orbital, vibrasi, termodinamika, dan lingkungan pelarut. Dengan demikian, mahasiswa dapat melihat hubungan yang lebih utuh antara teori kimia, data komputasi, dan penjelasan molekuler.

Penulis menyadari bahwa materi praktikum ini masih dapat dikembangkan lebih lanjut. Perkembangan software, metode komputasi, basis set, model pelarut, serta integrasi kecerdasan buatan dalam analisis data kimia akan terus membuka peluang penyempurnaan. Oleh karena itu, kritik dan saran dari pembaca, dosen, guru, mahasiswa, dan praktisi kimia komputasi sangat diharapkan demi perbaikan edisi berikutnya.

Akhirnya, semoga Bagian II: Materi Praktikum Bab 4 sampai Bab 10 ini bermanfaat sebagai panduan praktis, akademik, dan pedagogis dalam mempelajari kimia komputasi. Semoga buku ini membantu mahasiswa dan calon guru kimia membangun keterampilan komputasi yang teliti, kritis, dan bertanggung jawab, serta mampu menghubungkan hasil perhitungan dengan pemahaman kimia yang lebih mendalam.

Penulis,

KASMUI

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	4
DAFTAR ISI.....	6
BAGIAN 2	51
MATERI PRAKTIKUM	51
BAB 4	52
Pengantar Bab 4.....	52
4.1 Tujuan Praktikum	53
1. Memahami Kuantisasi Energi	54
2. Memvisualisasikan Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$	54
3. Memahami Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$	55
4. Memahami Simpul dan Hubungannya dengan Energi	56
5. Memahami Hubungan Panjang Kotak terhadap Energi	56
6. Menguasai Keterampilan Python Dasar dalam Praktikum.....	57
7. Menghubungkan Model dengan Elektron π dalam Molekul Terkonjugasi	58
8. Tujuan Operasional Praktikum	58
9. Indikator Keberhasilan Praktikum.....	59
10. Analisis Kritis terhadap Tujuan Praktikum	60
11. Implikasi Pembelajaran	60
12. Transisi ke Dasar Teori	61
4.2 Dasar Teori.....	61
1. Persamaan Schrödinger untuk Partikel dalam Kotak	62
2. Mengapa Energi Terkuantisasi?.....	63
3. Mengapa $n = 0$ Tidak Diperbolehkan?	63
4. Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$	64
5. Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$	65
6. Simpul dalam Fungsi Gelombang	66
7. Hubungan Panjang Kotak dengan Energi.....	66
8. Transisi Energi dan Serapan Cahaya	67
9. Kaitan dengan Elektron π dalam Molekul Terkonjugasi.....	68
10. Batas dan Kekuatan Model Partikel dalam Kotak.....	69

11. Implikasi untuk Praktikum Python	69
12. Contoh Interpretasi Konseptual	70
13. Sintesis Teori	70
4.3 Software yang Digunakan	71
1. Python sebagai Bahasa Utama Praktikum	72
2. Jupyter Notebook sebagai Buku Kerja Komputasional	73
3. Google Colab sebagai Alternatif Tanpa Instalasi Lokal	74
4. ChemCompute Jupyter Notebook jika Tersedia	75
5. Spreadsheet sebagai Pembanding	76
6. Perbandingan Fungsi Software	77
7. Alur Pemilihan Software dalam Praktikum	77
8. Kebutuhan Paket Python	78
9. Struktur Folder Praktikum	78
10. Contoh Pembagian Peran Software pada Satu Praktikum	79
11. Analisis Kritis terhadap Penggunaan Software	79
12. Implikasi Pedagogis	80
13. Persiapan Sebelum Masuk ke Jalur ChemCompute	81
4.4 Jalur ChemCompute	81
1. Makna Jalur ChemCompute dalam Praktikum Ini	82
2. Latar Historis: Dari Instalasi Lokal ke Notebook Berbasis Web	82
3. Posisi ChemCompute/Jupyter dalam Alur Praktikum	83
4. Persiapan Sebelum Menggunakan ChemCompute/Jupyter	84
5. Langkah Operasional Jalur ChemCompute	85
6. Struktur Notebook yang Disarankan	87
7. Contoh Isi Notebook ChemCompute	87
8. Ekspor Output dari Jalur ChemCompute	89
9. Validasi Hasil Jalur ChemCompute	90
10. Tugas Modifikasi pada Jalur ChemCompute	90
11. Analisis Kritis Jalur ChemCompute	91
12. Perbandingan Jalur ChemCompute dengan Jalur Python Mandiri	91
13. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	92
14. Contoh Format Laporan untuk Jalur ChemCompute	92
15. Kesalahan Umum Jalur ChemCompute	93

16. Sintesis Subbab.....	94
4.5 Jalur Python Mandiri.....	94
1. Kedudukan Jalur Python Mandiri dalam Praktikum.....	95
2. Struktur Folder Jalur Python Mandiri.....	95
3. Prinsip Teori yang Diterjemahkan ke Kode.....	96
4. Paket Python yang Digunakan.....	97
5. Kode Lengkap Jalur Python Mandiri.....	97
6. Penjelasan Bagian Kode	102
7. Perhitungan Energi E_n	103
8. Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$	104
9. Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$	105
10. Grafik untuk $n = 1$ sampai 5	105
11. Tabel Energi dalam Joule dan Elektronvolt.....	106
12. Simulasi Perubahan Panjang Kotak	106
13. Validasi Hasil Kode.....	107
14. Analisis Kritis terhadap Jalur Python Mandiri	108
15. Kesalahan Umum pada Jalur Python Mandiri.....	108
16. Modifikasi Wajib untuk Mahasiswa	109
17. Keterkaitan dengan Elektron π	110
18. Output yang Harus Diperoleh dari Jalur Python Mandiri	110
19. Format Analisis dalam Laporan.....	111
20. Implikasi Pembelajaran Jalur Python Mandiri	112
21. Sintesis Subbab.....	112
4.6 Nama File Kode.....	112
1. Makna Nama File <code>praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py</code>	113
2. Nama File sebagai Metadata Ilmiah.....	114
3. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	115
4. Posisi File dalam Struktur Folder Praktikum.....	115
5. Nama File dan Reprodusibilitas	116
6. Nama File dalam Hubungan dengan Notebook	117
7. Versi File dan Larangan Nama Ganda yang Membingungkan.....	117
8. Nama File dan Kemudahan Pemeriksaan Dosen	118
9. Nama File dan Keterbacaan Proyek	118

10. Nama File dan Isi Minimal yang Harus Ada.....	119
11. Contoh Header Metadata dalam File.....	120
12. Hubungan Nama File dengan Model Partikel dalam Kotak.....	120
13. Kesalahan Umum dalam Penamaan File.....	121
14. Cara Menjalankan File Berdasarkan Nama Standar.....	121
15. Nama File dalam Laporan Praktikum.....	122
16. Nama File dan Integritas Akademik.....	122
17. Analisis Kritis terhadap Standarisasi Nama File.....	123
18. Implikasi untuk Praktikum Berikutnya.....	123
19. Checklist Nama File.....	124
20. Sintesis Subbab.....	124
4.7 Output Kode.....	125
1. Kedudukan Output dalam Praktikum Komputasi.....	125
2. Output Pertama: Tabel Energi.....	126
3. Output Kedua: Grafik Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$	127
4. Output Ketiga: Grafik Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$	128
5. Output Keempat: Grafik Energi terhadap n	129
6. Output Kelima: File CSV Hasil Perhitungan.....	130
7. Output Tambahan yang Disarankan: Grafik Pengaruh Panjang Kotak terhadap Energi.....	131
8. Output Tambahan yang Disarankan: Ringkasan Numerik di Terminal.....	131
9. Standar Kualitas Tabel Output.....	132
10. Standar Kualitas Grafik Output.....	133
11. Validasi Output.....	133
12. Kesalahan Umum pada Output Kode.....	134
13. Hubungan Output dengan Laporan Praktikum.....	135
14. Output sebagai Bukti Pemahaman Konsep.....	136
15. Analisis Kritis terhadap Output Digital.....	136
16. Checklist Output Kode.....	137
17. Contoh Struktur Output Akhir.....	137
18. Implikasi Pedagogis Output Kode.....	138
19. Transisi ke Subbab Analisis.....	138
4.8 Analisis.....	138
1. Analisis Kuantisasi Energi.....	139

2. Analisis Hubungan n , Energi, dan Simpul	140
3. Analisis Fungsi Gelombang ψ	141
4. Analisis Rapat Probabilitas ψ^2	142
5. Analisis Hubungan Panjang Kotak dengan Energi	143
6. Analisis Hubungan Kuantisasi dan Panjang Kotak	143
7. Analisis Simpul dan Probabilitas	144
8. Analisis Grafik Energi terhadap n	145
9. Analisis Grafik Pengaruh Panjang Kotak	146
10. Analisis dengan Contoh Konkret	146
11. Analisis Keterkaitan dengan Elektron π	147
12. Analisis Keterbatasan Model	148
13. Analisis Kesalahan dan Validasi	148
14. Format Penulisan Analisis dalam Laporan	149
15. Contoh Analisis Terpadu	149
16. Implikasi Pembelajaran dari Analisis	150
17. Transisi ke Pertanyaan Diskusi	150
4.9 Pertanyaan Diskusi	151
1. Mengapa $n = 0$ Tidak Diperbolehkan?	151
2. Apa Arti Simpul dalam Fungsi Gelombang?	153
3. Mengapa Energi Meningkat Ketika Panjang Kotak Mengecil?	154
4. Bagaimana Model Ini Membantu Memahami Elektron π ?	155
5. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik	156
6. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi	157
7. Pertanyaan Pengayaan untuk Diskusi Lanjutan	158
8. Contoh Jawaban Terpadu Pertanyaan Diskusi	158
9. Kesalahan Konseptual yang Harus Dihindari	159
10. Implikasi Pembelajaran Pertanyaan Diskusi	160
11. Keterkaitan dengan Praktikum Berikutnya	160
Penutup Bab 4	160
Rangkuman Bab 4	162
Implikasi Pembelajaran Bab 4	162
Arah Menuju Bab 5	163
Daftar Pustaka Bab 4	163

BAB 5	166
Pengantar Bab 5.....	166
5.1 Tujuan Praktikum	167
1. Membangun Struktur Molekul Awal.....	168
2. Melakukan Optimasi Geometri	168
3. Menganalisis Panjang Ikatan.....	169
4. Menganalisis Sudut Ikatan.....	170
5. Menganalisis Energi Total.....	170
6. Memahami Status Konvergensi.....	171
7. Menghubungkan Optimasi dengan Teori VSEPR.....	172
8. Mengembangkan Keterampilan Membaca File Output	172
9. Menggunakan Python untuk Analisis Geometri.....	173
10. Molekul Model sebagai Sarana Bertahap.....	173
11. Tujuan Operasional Praktikum	174
12. Indikator Keberhasilan Praktikum.....	174
13. Analisis Kritis terhadap Tujuan Praktikum	175
14. Implikasi Pembelajaran	175
15. Transisi ke Dasar Teori	176
5.2 Dasar Teori.....	176
1. Definisi Optimasi Geometri.....	177
2. Permukaan Energi Potensial.....	177
3. Aproksimasi Born–Oppenheimer dan Geometri Molekul.....	178
4. Gradien Energi dan Gaya pada Atom	179
5. Titik Stasioner, Minimum, dan Titik Pelana.....	180
6. Geometri Keseimbangan.....	181
7. Hessian, Kelengkungan Permukaan, dan Frekuensi Vibrasi	181
8. Kriteria Konvergensi	182
9. Energi Total dan Energi Relatif dalam Optimasi	183
10. Koordinat Molekul: Cartesian dan Internal	184
11. Contoh Teori pada Molekul H_2	184
12. Contoh Teori pada H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2	185
13. Hubungan Geometri dengan Sifat Molekul.....	185
14. Analisis Kritis terhadap Dasar Teori Optimasi	186

15. Implikasi Pedagogis	186
16. Transisi ke Software yang Digunakan	187
5.3 Software yang Digunakan	187
1. Prinsip Pemilihan Software dalam Optimasi Geometri	188
2. ChemCompute sebagai Platform Web Praktikum	188
3. Avogadro sebagai Editor dan Visualizer Molekul	189
4. GAMESS sebagai Mesin Perhitungan melalui ChemCompute	190
5. ORCA sebagai Alternatif Perhitungan Lokal atau Institusional	191
6. Gaussian sebagai Software Komersial Struktur Elektronik	192
7. Psi4 sebagai Software Open-Source Berbasis Python	192
8. Python sebagai Alat Analisis Pascaproses	193
9. Perbandingan Peran Software dalam Praktikum	194
10. Alur Kerja Software yang Direkomendasikan	195
11. Contoh Pembagian Tugas Software Berdasarkan Molekul	196
12. Standar Informasi Software yang Harus Dicatat	196
13. Analisis Kritis terhadap Pemakaian Banyak Software	197
14. Implikasi Etika dan Legalitas Software	197
15. Implikasi Pedagogis	198
16. Transisi ke Molekul Model	198
5.4 Molekul Model	199
1. Fungsi Molekul Model dalam Praktikum Optimasi Geometri	199
2. Prinsip Umum Pemilihan Molekul Model	200
3. H ₂ sebagai Model Molekul Diatomik	201
4. H ₂ O sebagai Model Molekul Bengkok	202
5. NH ₃ sebagai Model Trigonal Piramida	203
6. CH ₄ sebagai Model Tetrahedral	204
7. CO ₂ sebagai Model Linear	205
8. Urutan Pedagogis Molekul Model	206
9. Parameter yang Harus Dianalisis pada Setiap Molekul	206
10. Struktur Awal dan Struktur Akhir	207
11. Status Muatan dan Multiplicity Molekul Model	207
12. Hubungan Molekul Model dengan Teori VSEPR	208
13. Perbandingan dengan Data Literatur	209

14. Contoh Tabel Rancangan Praktikum Molekul Model	209
15. Contoh Penamaan File untuk Molekul Model	210
16. Analisis Kritis terhadap Molekul Model.....	210
17. Implikasi Pembelajaran dari Molekul Model	211
18. Transisi ke Jalur ChemCompute.....	212
5.5 Jalur ChemCompute	212
1. Pengertian Jalur ChemCompute dalam Praktikum Optimasi Geometri.....	212
2. Kedudukan ChemCompute dalam Alur Praktikum	213
3. Persiapan Sebelum Menggunakan ChemCompute	214
4. Membuat Struktur Awal Molekul.....	215
5. Memilih Jenis Perhitungan: Optimasi Geometri	216
6. Memilih Metode dan Basis Set.....	216
7. Mengatur Muatan dan Multiplicity	217
8. Menjalankan Job Optimasi.....	218
9. Mengunduh File Output.....	218
10. Memeriksa Status Konvergensi	219
11. Mengambil Koordinat Akhir	220
12. Menyusun File Awal dan Akhir untuk Analisis Python.....	220
13. Contoh Alur Praktikum untuk H ₂ O.....	221
14. Contoh Alur Praktikum untuk CO ₂	222
15. Hal yang Harus Dicatat dalam Laporan.....	223
16. Validasi Hasil Jalur ChemCompute.....	224
17. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute	224
18. Checklist Jalur ChemCompute.....	225
19. Analisis Kritis terhadap Jalur ChemCompute.....	225
20. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	226
21. Transisi ke Jalur Python Mandiri	226
5.6 Jalur Python Mandiri	226
1. Kedudukan Python dalam Praktikum Optimasi Geometri	227
2. Struktur Folder Jalur Python Mandiri.....	228
3. Format File XYZ.....	228
4. Perhitungan Jarak Antaratom	229
5. Perhitungan Sudut Ikatan.....	230

6. Kode Lengkap Jalur Python Mandiri	230
7. Penjelasan Bagian Kode	238
8. Output yang Dihasilkan oleh Kode	239
9. Analisis Panjang Ikatan dengan Python	240
10. Analisis Sudut Ikatan dengan Python	240
11. Plot Struktur 3D Sederhana.....	241
12. Perbandingan Geometri Awal dan Akhir.....	241
13. Pemeriksaan Kewajaran Hasil	242
14. Contoh Interpretasi Hasil Python	242
15. Keterbatasan Jalur Python Mandiri	243
16. Kesalahan Umum Jalur Python Mandiri	244
17. Checklist Jalur Python Mandiri	244
18. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri.....	245
19. Transisi ke Nama File Kode.....	245
5.7 Nama File Kode.....	245
1. Makna Nama File praktikum_02_optimasi_geometri.py.....	246
2. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	246
3. Kedudukan File dalam Struktur Folder Praktikum	247
4. File Kode sebagai Penghubung Input dan Output.....	248
5. Isi Minimal File praktikum_02_optimasi_geometri.py	248
6. Header Identitas dalam File Kode.....	249
7. Hubungan Nama File dengan Praktikum 2.....	250
8. Cara Menjalankan File Kode.....	250
9. Hubungan Nama File dengan File Input	251
10. Hubungan Nama File dengan File Output Optimasi.....	252
11. Output yang Harus Dihasilkan oleh File Kode	252
12. Penamaan File Versi Percobaan.....	253
13. Nama File dan Integritas Akademik	254
14. Nama File dalam Laporan Praktikum	254
15. Nama File dan Pemeriksaan Dosen	255
16. Kesalahan Umum dalam Penamaan File.....	255
17. Pemeriksaan Isi File Berdasarkan Nama	256
18. Checklist Nama File Kode.....	256

19. Implikasi Pedagogis Penamaan File	257
20. Transisi ke Output Kode	257
5.8 Output Kode	258
1. Kedudukan Output Kode dalam Praktikum Optimasi Geometri.....	258
2. Output Pertama: Tabel Panjang Ikatan	259
3. Output Kedua: Tabel Sudut Ikatan	260
4. Output Ketiga: Gambar Struktur 3D Sederhana	261
5. Output Keempat: Perbandingan Geometri Awal dan Akhir.....	262
6. Output Kelima: File CSV Hasil Analisis Geometri	263
7. Output Tambahan: Ringkasan Eksekusi di Terminal	264
8. Output Berdasarkan Molekul Model.....	265
9. Standar Kualitas Tabel Panjang Ikatan	265
10. Standar Kualitas Tabel Sudut Ikatan	266
11. Standar Kualitas Gambar Struktur 3D	267
12. Validasi Output Kode	267
13. Hubungan Output Kode dengan Status Konvergensi	268
14. Hubungan Output Kode dengan Teori VSEPR.....	268
15. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum	269
16. Contoh Narasi Output untuk Laporan	270
17. Kesalahan Umum pada Output Kode.....	270
18. Checklist Output Kode	271
19. Analisis Kritis terhadap Output Kode	271
20. Implikasi Pedagogis Output Kode.....	272
21. Transisi ke Subbab Analisis	272
5.9 Analisis	272
1. Pengertian Analisis Hasil Optimasi Geometri.....	273
2. Langkah Pertama: Memeriksa Status Konvergensi.....	274
3. Langkah Kedua: Membandingkan Energi Awal dan Akhir	275
4. Langkah Ketiga: Membandingkan Geometri Awal dan Akhir.....	275
5. Analisis Berdasarkan Teori VSEPR	276
6. Analisis H ₂	277
7. Analisis H ₂ O.....	277
8. Analisis NH ₃	278

9. Analisis CH₄	279
10. Analisis CO₂	279
11. Perbandingan dengan Data Literatur	280
12. Perbedaan Hasil Akibat Metode Komputasi	281
13. Analisis Kesalahan dan Ketidakpastian	282
14. Contoh Format Analisis dalam Laporan	282
15. Contoh Analisis Terpadu	283
16. Analisis Kritis terhadap VSEPR dan Data Komputasi	284
17. Implikasi Analisis terhadap Pemahaman Molekul	284
18. Checklist Analisis	285
19. Transisi ke Pertanyaan Diskusi	285
5.10 Pertanyaan Diskusi	285
1. Mengapa Struktur Awal Perlu Dioptimasi?	286
2. Apa Arti Konvergensi?	287
3. Mengapa Metode Komputasi Berbeda Dapat Menghasilkan Geometri Berbeda?	289
4. Apa Hubungan Energi Minimum dengan Geometri Stabil?	290
5. Contoh Jawaban Diskusi Terpadu	291
6. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik	291
7. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi	292
8. Pertanyaan Pengayaan untuk Diskusi Lanjutan	292
9. Kesalahan Konseptual yang Harus Dihindari	293
10. Implikasi Pembelajaran Pertanyaan Diskusi	294
11. Penutup Subbab dan Arah Setelah Bab 5	294
Penutup Bab 5.....	294
Ringkasan Bab	295
Sintesis Gagasan Utama Bab 5.....	296
Implikasi Keilmuan	296
Implikasi Praktis	297
Keterbatasan Pembahasan Bab 5	297
Arah Menuju Bab Berikutnya.....	298
Daftar Pustaka Bab 5.....	298
BAB 6	299
Pengantar Bab 6.....	299

6.1 Tujuan Praktikum	300
1. Memahami Hartree–Fock sebagai Metode Dasar Ab Initio.....	301
2. Memahami Fungsi Basis sebagai Representasi Orbital Molekul	301
3. Memahami Energi Total Molekul.....	302
4. Memahami Pengaruh Basis Set terhadap Energi Total.....	303
5. Memahami Pengaruh Basis Set terhadap Panjang Ikatan	303
6. Memahami Biaya Komputasi	304
7. Memahami Single Point Energy dan Optimasi Geometri	304
8. Molekul Model sebagai Sarana Pembelajaran.....	305
9. Tujuan Operasional Praktikum.....	306
10. Indikator Keberhasilan Praktikum.....	306
11. Analisis Kritis terhadap Tujuan Praktikum	307
12. Implikasi Pembelajaran	307
13. Transisi ke Dasar Teori	308
6.2 Dasar Teori	308
1. Masalah Banyak Elektron dalam Molekul.....	309
2. Gagasan Dasar Hartree–Fock.....	310
3. Metode Medan Konsisten-Diri atau Self-Consistent Field.....	310
4. Operator Fock, Coulomb, dan Exchange	311
5. Orbital Molekul dalam Hartree–Fock	312
6. Roothaan–Hall dan Fungsi Basis.....	312
7. Jenis-Jenis Fungsi Basis.....	313
8. Basis Set Minimal, Split-Valence, Polarisasi, dan Difus.....	314
9. Energi Elektronik dan Energi Total dalam Hartree–Fock.....	315
10. Prinsip Variasional dan Energi Hartree–Fock.....	315
11. Keterbatasan Hartree–Fock.....	316
12. Restricted dan Unrestricted Hartree–Fock	317
13. Single Point Energy dan Optimasi Geometri dalam Kerangka Hartree–Fock.....	317
14. Jumlah Fungsi Basis dan Biaya Komputasi	318
15. Konvergensi Basis Set Sederhana.....	318
16. Contoh Konseptual pada Molekul Model.....	319
17. Analisis Kritis terhadap Energi Lebih Rendah.....	319
18. Implikasi Pedagogis Dasar Teori Hartree–Fock dan Basis Set	320

19. Transisi ke Software yang Digunakan	320
6.3 Software yang Digunakan	321
1. Prinsip Pemilihan Software dalam Praktikum Hartree–Fock dan Basis Set.....	321
2. ChemCompute sebagai Platform Web Praktikum	322
3. GAMESS sebagai Mesin Perhitungan Utama melalui ChemCompute	323
4. ORCA sebagai Alternatif Perhitungan Lokal dan Institusional	324
5. Gaussian sebagai Software Struktur Elektronik Komersial	325
6. Psi4 sebagai Software Open-Source Berbasis C++/Python.....	326
7. PySCF sebagai Kerangka Kimia Kuantum Berbasis Python	326
8. Python sebagai Alat Analisis Data Praktikum.....	328
9. Perbandingan Peran Software	328
10. Alur Kerja Praktikum yang Direkomendasikan.....	329
11. Standar Informasi Software yang Harus Dicatat.....	330
12. Analisis Kritis terhadap Penggunaan Banyak Software.....	331
13. Etika, Lisensi, dan Reprodusibilitas	331
14. Implikasi Pedagogis Software dalam Bab 6.....	332
15. Transisi ke Molekul Model	332
6.4 Molekul Model.....	332
1. Fungsi Molekul Model dalam Praktikum Hartree–Fock.....	333
2. Prinsip Pemilihan Molekul Model	334
3. H ₂ sebagai Molekul Kovalen Paling Sederhana.....	334
4. LiH sebagai Model Ikatan Polar dengan Atom Berbeda Ukuran.....	335
5. HF sebagai Model Ikatan Sangat Polar.....	336
6. H ₂ O sebagai Model Molekul Bengkok dengan Pasangan Elektron Bebas	337
7. CH ₄ sebagai Model Tetrahedral dengan Simetri Tinggi	338
8. Perbandingan Pedagogis Kelima Molekul Model	339
9. Status Muatan dan Multiplicity Molekul Model	339
10. Basis Set yang Disarankan untuk Molekul Model	340
11. Jenis Perhitungan pada Molekul Model.....	340
12. Parameter yang Harus Dicatat untuk Setiap Molekul.....	341
13. Contoh Struktur Awal Molekul Model	342
14. Analisis Kritis terhadap Molekul Model	343
15. Implikasi Pembelajaran Molekul Model	343

16. Transisi ke Jalur ChemCompute	344
6.5 Jalur ChemCompute.....	344
1. Pengertian Jalur ChemCompute pada Praktikum 3	345
2. Tujuan Jalur ChemCompute	346
3. Persiapan Sebelum Menggunakan ChemCompute	346
4. Struktur Folder Kerja.....	347
5. Single Point Energy melalui ChemCompute.....	348
6. Optimasi Geometri melalui ChemCompute.....	349
7. Urutan Praktikum yang Direkomendasikan	349
8. Data yang Harus Dicatat dari ChemCompute/GAMESS.....	350
9. Membaca Energi Total dari Output	351
10. Membaca Jumlah Fungsi Basis.....	351
11. Membaca Waktu Komputasi.....	352
12. Contoh Jalur ChemCompute untuk H ₂ O	353
13. Contoh Jalur ChemCompute untuk H ₂	354
14. Contoh Jalur ChemCompute untuk HF	355
15. Validasi Hasil Jalur ChemCompute.....	355
16. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute.....	356
17. Checklist Jalur ChemCompute	356
18. Analisis Kritis terhadap Jalur ChemCompute	357
19. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	357
20. Transisi ke Jalur Python Mandiri	358
6.6 Jalur Python Mandiri	358
1. Kedudukan Python dalam Praktikum 3.....	359
2. Data yang Diperlukan.....	359
3. Struktur Folder Jalur Python Mandiri.....	360
4. Format File CSV Input.....	361
5. Kode Python Jalur Mandiri	361
6. Penjelasan Bagian Kode	368
7. Input Data Energi dari Beberapa Basis Set.....	369
8. Tabel Metode, Basis Set, Jumlah Fungsi Basis, Energi Total, dan Waktu Komputasi	370
9. Grafik Energi terhadap Ukuran Basis Set	370
10. Grafik Waktu Komputasi terhadap Ukuran Basis Set	371

11. Perhitungan Selisih Energi Antar Basis Set	371
12. Analisis Konvergensi Basis Set Sederhana	372
13. Ringkasan Basis Set Paling Efisien	373
14. Output yang Dihasilkan Kode	373
15. Validasi Hasil Python	374
16. Kesalahan Umum Jalur Python Mandiri	374
17. Contoh Interpretasi Hasil Python	375
18. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri	376
19. Transisi ke Nama File Kode	376
6.7 Nama File Kode	376
1. Makna Nama File	377
2. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	377
3. Posisi File dalam Struktur Folder Praktikum	378
4. Hubungan Nama File dengan Reprodusibilitas	379
5. Isi Minimal File Kode	380
6. Header Identitas File Kode	380
7. Nama File Input yang Terkait	381
8. Nama File Output yang Dihasilkan	382
9. Cara Menjalankan File Kode	383
10. Konsistensi Nama File dengan Laporan Praktikum	383
11. Versi File dan Pengendalian Revisi	384
12. Penamaan Variabel yang Selaras dengan Nama File	385
13. Penamaan Fungsi dalam File Kode	385
14. Risiko Jika Nama File Tidak Konsisten	386
15. Hubungan Nama File dengan Pemeriksaan Dosen	386
16. Hubungan Nama File dengan Jejak Ilmiah	387
17. Contoh Identitas File dalam Laporan	388
18. Analisis Kritis terhadap Penamaan File	388
19. Standar Pengumpulan File Kode	388
20. Transisi ke Output Kode	389
6.8 Output Kode	389
1. Kedudukan Output Kode dalam Praktikum 3	390
2. Output Pertama: Tabel Energi Total	391

3. Makna Teoretis Tabel Energi Total	392
4. Output Kedua: Grafik Energi vs Basis Set.....	392
5. Contoh Interpretasi Grafik Energi	393
6. Output Ketiga: Grafik Waktu Komputasi vs Basis Set	393
7. Contoh Interpretasi Grafik Waktu.....	394
8. Output Keempat: File CSV Hasil Analisis	394
9. Tabel Selisih Energi Antar Basis Set.....	395
10. Makna Analisis Selisih Energi	396
11. Output Kelima: Ringkasan Basis Set Paling Efisien.....	396
12. Contoh Interpretasi Ringkasan Efisiensi.....	397
13. Standar Kualitas Output Kode.....	397
14. Validasi Output Tabel.....	398
15. Validasi Output Grafik	398
16. Kesalahan Umum pada Output Kode.....	399
17. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum.....	399
18. Analisis Kritis terhadap Output Kode	400
19. Implikasi Pedagogis Output Kode	400
20. Transisi ke Subbab Analisis	400
6.9 Analisis	401
1. Makna Analisis dalam Praktikum Hartree–Fock dan Basis Set	401
2. Hubungan Ukuran Basis Set dengan Energi Total.....	402
3. Hubungan Jumlah Fungsi Basis dengan Waktu Komputasi	403
4. Kompromi antara Akurasi dan Biaya Komputasi	404
5. Analisis Molekul H_2	404
6. Analisis Molekul LiH	405
7. Analisis Molekul HF	406
8. Analisis Molekul H_2O	406
9. Analisis Molekul CH_4	407
10. Analisis Selisih Energi Antar Basis Set	408
11. Analisis Konvergensi Basis Set Sederhana	408
12. Hubungan Akurasi dengan Keterbatasan Hartree–Fock.....	409
13. Analisis Efisiensi Basis Set	410
14. Contoh Analisis Efisiensi pada Data Praktikum.....	410

15. Analisis Perbandingan Single Point dan Optimasi Geometri	411
16. Analisis Validitas Data	411
17. Kesalahan Analisis yang Harus Dihindari	412
18. Format Analisis dalam Laporan.....	412
19. Contoh Analisis Terpadu	413
20. Implikasi Analisis terhadap Pembelajaran Kimia Komputasi	413
21. Transisi ke Pertanyaan Diskusi	414
6.10 Pertanyaan Diskusi.....	414
1. Mengapa Basis Set Lebih Besar Umumnya Menghasilkan Energi Lebih Rendah?.....	415
2. Mengapa Hartree–Fock Belum Memasukkan Korelasi Elektron secara Lengkap?	416
3. Apa Konsekuensi Penggunaan Basis Set Terlalu Kecil?	417
4. Apa Hubungan Ukuran Basis Set dengan Waktu Komputasi?	418
5. Contoh Jawaban Diskusi Terpadu	419
6. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik	420
7. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi.....	420
8. Pertanyaan Pengayaan untuk Diskusi Lanjutan	421
9. Kesalahan Konseptual yang Harus Dihindari	421
10. Implikasi Pembelajaran Pertanyaan Diskusi	422
11. Penutup Subbab dan Arah Setelah Bab 6	422
Penutup Bab 6	423
Ringkasan Bab	423
Sintesis Gagasan Utama Bab 6	424
Implikasi Keilmuan	425
Implikasi Praktis.....	425
Keterbatasan Pembahasan Bab 6.....	426
Arah Menuju Bab Berikutnya.....	426
Daftar Pustaka Bab 6.....	427
BAB 7	429
7.1 Tujuan Praktikum	430
1. Memahami DFT sebagai Metode Struktur Elektronik	431
2. Memahami HOMO sebagai Orbital Donor Elektron	432
3. Memahami LUMO sebagai Orbital Akseptor Elektron.....	433
4. Menghitung Gap HOMO-LUMO.....	433

5. Menghubungkan Konjugasi dengan Gap HOMO-LUMO	434
6. Menghubungkan Substituen dengan Distribusi Elektron	435
7. Menghitung Parameter Reaktivitas Global Sederhana	435
8. Memvisualisasikan Orbital Molekul	436
9. Menyusun Analisis dengan Python	437
10. Mengembangkan Sikap Kritis terhadap Analisis HOMO-LUMO	437
11. Indikator Keberhasilan Praktikum	438
12. Transisi ke Dasar Teori	438
7.2 Dasar Teori	438
1. Density Functional Theory sebagai Metode Struktur Elektronik	439
2. Latar Historis DFT	440
3. Teori Kohn–Sham secara Konseptual	440
4. Energi Orbital dalam DFT	441
5. HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital	442
6. LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital	443
7. Teori Orbital Frontier dan Reaktivitas Molekul	443
8. Gap HOMO-LUMO	444
9. Donor Elektron dan Akseptor Elektron	445
10. Konjugasi dan Delokalisasi Elektron	446
11. Substituen dan Pengaruh Elektronik	447
12. Parameter Reaktivitas Global	447
13. Stabilitas, Reaktivitas, dan Batas Interpretasi	448
14. Contoh Analisis Konseptual Molekul Model	449
15. Implikasi Teori bagi Praktikum	449
16. Transisi ke Software yang Digunakan	450
7.3 Software yang Digunakan	450
1. Prinsip Pemilihan Software pada Praktikum 4	451
2. ChemCompute sebagai Platform Web Praktikum	452
3. ORCA sebagai Mesin Perhitungan DFT	452
4. GAMESS sebagai Alternatif Perhitungan Struktur Elektronik	453
5. Gaussian sebagai Software Struktur Elektronik Komersial	454
6. Avogadro sebagai Editor dan Visualisasi Molekul	455
7. Gabedit sebagai Antarmuka Preprocessing dan Postprocessing	456

8. Molden sebagai Software Visualisasi Orbital Molekul.....	457
9. Jmol sebagai Viewer Molekul dan Orbital	458
10. Python sebagai Alat Analisis HOMO-LUMO dan Reaktivitas	458
11. Perbandingan Peran Software	459
12. Workflow Praktikum yang Direkomendasikan	460
13. Data Minimum yang Harus Dihasilkan Software	461
14. Etika Penggunaan Software	461
15. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software	462
16. Implikasi Pedagogis Pemilihan Software	462
17. Transisi ke Molekul Model	463
7.4 Molekul Model	463
1. Prinsip Pemilihan Molekul Model.....	464
2. Ringkasan Peran Molekul Model	465
3. Etilena sebagai Sistem π Paling Sederhana	465
4. Butadiena sebagai Sistem π Terkonjugasi	466
5. Benzena sebagai Sistem Aromatik.....	467
6. Formaldehida sebagai Model Gugus Karbonil	468
7. Nitrobenzena sebagai Model Substituen Penarik Elektron	469
8. Urutan Pembelajaran Molekul Model	470
9. Parameter yang Harus Dicatat untuk Setiap Molekul	471
10. Muatan dan Multiplicity Molekul Model	472
11. Struktur Awal Molekul Model.....	472
12. Perbandingan Konseptual Antarmolekul.....	473
13. Kesalahan Umum dalam Pemilihan dan Analisis Molekul Model	474
14. Implikasi Pedagogis Molekul Model	474
15. Transisi ke Jalur ChemCompute.....	475
7.5 Jalur ChemCompute.....	475
1. Pengertian Jalur ChemCompute	476
2. Kedudukan ChemCompute dalam Pembelajaran Kimia Komputasi	476
3. Persiapan Struktur Molekul Sebelum Masuk ChemCompute	477
4. Pemilihan Metode pada Jalur ChemCompute	478
5. Jenis Job yang Digunakan.....	478
6. Langkah Umum Menjalankan Perhitungan di ChemCompute	479

7. Cara Membaca HOMO dan LUMO dari Output	481
8. Konversi Satuan Energi Orbital	482
9. Format Tabel Data Awal dari ChemCompute	483
10. Pengambilan Data Orbital Molekul.....	483
11. Contoh Alur untuk Etilena.....	484
12. Contoh Alur untuk Butadiena	485
13. Contoh Alur untuk Benzena	485
14. Contoh Alur untuk Formaldehida	486
15. Contoh Alur untuk Nitrobenzena.....	487
16. Validasi Output.....	487
17. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute.....	488
18. Format Penyimpanan File	488
19. Hubungan Jalur ChemCompute dengan Jalur Python	489
20. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	490
21. Transisi ke Jalur Python Mandiri	490
7.6 Jalur Python Mandiri	491
1. Kedudukan Python dalam Praktikum 4	491
2. Latar Historis Singkat Penggunaan Python dalam Sains Komputasi	492
3. Data Masukan Energi HOMO dan LUMO	493
4. Rumus Dasar Analisis HOMO-LUMO.....	493
5. Batas Interpretasi Parameter Reaktivitas Global.....	495
6. Struktur Data dalam Python	495
7. Contoh Data Latihan	496
8. Kode Python untuk Analisis HOMO-LUMO.....	496
9. Penjelasan Bagian Kode	500
10. Output Tabel Analisis.....	501
11. Grafik Perbandingan Gap HOMO-LUMO.....	502
12. Diagram Tingkat Energi Orbital.....	502
13. Interpretasi HOMO Tinggi dan LUMO Rendah.....	503
14. Analisis Hardness dan Softness	504
15. Analisis Elektronegativitas Mulliken	504
16. Analisis Indeks Elektrofilitas	505
17. Validasi Data Sebelum Analisis Python	505

18. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri.....	506
19. Format Laporan Hasil Jalur Python.....	506
20. Implikasi Pembelajaran Jalur Python Mandiri	507
21. Transisi ke Nama File Kode.....	507
7.7 Nama File Kode.....	508
1. Makna Penamaan File dalam Praktikum Kimia Komputasi	508
2. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	509
3. Fungsi Angka 04 dalam Nama File	510
4. Makna Frasa DFT, HOMO, dan LUMO dalam Nama File	511
5. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python.....	511
6. Hubungan Nama File dengan Reprodusibilitas	512
7. Letak File dalam Struktur Folder Praktikum.....	513
8. Hubungan Nama File Kode dengan File Input dan Output	514
9. Versi File dan Revisi Kode	514
10. Komentar Identitas di Awal File Kode	515
11. Nama File dan Keterbacaan oleh Dosen	516
12. Nama File dan Integritas Akademik	516
13. Contoh Isi Minimal File praktikum_04_dft_homo_lumo.py	517
14. Kesalahan Umum dalam Penamaan File.....	518
15. Standar Pengumpulan File Kode.....	519
16. Implikasi Pedagogis Penamaan File.....	519
17. Transisi ke Output Kode	520
7.8 Output Kode.....	520
1. Kedudukan Output Kode dalam Workflow Praktikum	521
2. Output Pertama: Tabel HOMO, LUMO, dan Gap	521
3. Validasi Tabel HOMO, LUMO, dan Gap.....	522
4. Output Kedua: Diagram Energi Orbital	523
5. Kriteria Diagram Energi Orbital yang Baik	524
6. Output Ketiga: Grafik Gap HOMO-LUMO.....	525
7. Hubungan Grafik Gap dengan Konjugasi dan Substituen	526
8. Output Keempat: Tabel Parameter Reaktivitas Global.....	527
9. Interpretasi Tabel Parameter Reaktivitas Global	528
10. Output Kelima: File CSV Hasil Analisis.....	528

11. Folder Output yang Dianjurkan.....	529
12. Kriteria Output Kode yang Layak.....	530
13. Kesalahan Umum dalam Output Kode.....	531
14. Pemeriksaan Akhir Output Kode.....	531
15. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum.....	532
16. Implikasi Ilmiah Output Kode.....	532
17. Implikasi Pedagogis Output Kode.....	533
18. Transisi ke Analisis.....	533
7.9 Analisis.....	534
1. Makna Analisis dalam Praktikum HOMO-LUMO.....	534
2. Gap HOMO-LUMO sebagai Indikator Stabilitas Elektronik.....	535
3. Gap HOMO-LUMO dan Reaktivitas Molekul.....	536
4. Analisis Etilena sebagai Sistem π Sederhana.....	537
5. Analisis Butadiena dan Pengaruh Konjugasi.....	537
6. Analisis Benzena dan Delokalisasi Aromatik.....	538
7. Analisis Formaldehida sebagai Akseptor Elektron.....	539
8. Analisis Nitrobenzena dan Pengaruh Substituen.....	540
9. Analisis Hardness dan Softness.....	541
10. Analisis Elektronegativitas Mulliken.....	541
11. Analisis Indeks Elektrofilitas.....	542
12. Menghubungkan Data Numerik dengan Visualisasi Orbital.....	543
13. Contoh Pola Analisis Antarmolekul.....	543
14. Bahasa Ilmiah dalam Menulis Analisis.....	544
15. Kesalahan Umum dalam Analisis.....	545
16. Struktur Analisis yang Dianjurkan dalam Laporan.....	545
17. Implikasi Keilmuan Analisis HOMO-LUMO.....	546
18. Implikasi Pedagogis Analisis Praktikum 4.....	547
19. Transisi ke Pertanyaan Diskusi.....	547
7.10 Pertanyaan Diskusi.....	547
1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum Kimia Komputasi.....	548
2. Pertanyaan 1: Apa Arti HOMO dalam Reaksi Kimia?.....	549
3. HOMO, Nukleofilisitas, dan Donor Elektron.....	550
4. Pertanyaan 2: Apa Arti LUMO dalam Reaksi Kimia?.....	550

5. LUMO, Elektrofilitas, dan Akseptor Elektron.....	551
6. Interaksi HOMO-LUMO dalam Reaksi Kimia	552
7. Pertanyaan 3: Mengapa Butadiena Memiliki Gap Lebih Kecil daripada Etilena?	552
8. Konjugasi, Delokalisasi, dan Stabilitas Elektronik Butadiena	554
9. Pertanyaan 4: Bagaimana Gugus Nitro Memengaruhi Distribusi Elektron?	554
10. Gugus Nitro sebagai Substituen Penarik Elektron dalam Sistem Aromatik.....	555
11. Cara Menjawab Pertanyaan Diskusi secara Ilmiah	556
12. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik	556
13. Contoh Jawaban Ringkas yang Kurang Tepat dan Perbaikannya.....	557
14. Implikasi Diskusi terhadap Pemahaman Reaktivitas.....	558
15. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi	559
16. Rangkuman Subbab Pertanyaan Diskusi.....	559
Penutup Bab 7.....	559
Rangkuman Bab 7.....	561
Sintesis Gagasan Utama Bab 7	561
Implikasi Keilmuan Bab 7.....	562
Implikasi Praktis Bab 7.....	563
Keterbatasan Pembahasan Bab 7.....	563
Arah Menuju Bab Berikutnya.....	564
Daftar Pustaka Bab 7.....	564
BAB 8	567
PRAKTIKUM 5: SIMETRI MOLEKUL, KELOMPOK TITIK, DAN MOMEN DIPOL	567
Pengantar Bab 8.....	567
8.1 Tujuan Praktikum	568
1. Memahami Simetri Molekul sebagai Dasar Analisis Struktur	569
2. Mengidentifikasi Unsur Simetri Molekul	569
3. Menentukan Kelompok Titik Molekul.....	570
4. Menghubungkan Simetri Molekul dengan Momen Dipol.....	571
5. Memahami Polaritas sebagai Konsekuensi Geometri dan Distribusi Muatan.....	572
6. Memahami Hubungan Simetri dengan Aktivitas Optik dan Spektroskopi	572
7. Menggunakan Software untuk Memvisualisasikan dan Menguji Simetri	573
8. Menggunakan Python untuk Analisis Vektor Dipol Sederhana.....	574
9. Indikator Keberhasilan Praktikum.....	574

10. Keterampilan Konseptual yang Diharapkan.....	575
11. Keterampilan Komputasional yang Diharapkan.....	575
12. Keterampilan Analitis yang Diharapkan.....	576
13. Sikap Ilmiah yang Diharapkan.....	576
14. Transisi ke Dasar Teori.....	577
8.2 Dasar Teori.....	577
1. Pengertian Simetri Molekul.....	578
2. Operasi Simetri dan Unsur Simetri.....	579
3. Operasi Identitas E.....	579
4. Sumbu Rotasi Proper C_n	580
5. Bidang Cermin σ	580
6. Pusat Inversi i.....	581
7. Sumbu Rotasi Tidak Proper S_n	582
8. Kelompok Titik Molekul.....	582
9. Penentuan Kelompok Titik secara Konseptual.....	583
10. Polaritas Molekul dan Momen Dipol.....	584
11. Hubungan Simetri dengan Momen Dipol.....	585
12. Contoh H_2O dan CO_2 : Ikatan Polar Tidak Selalu Menghasilkan Molekul Polar.....	585
13. Contoh BF_3 dan NH_3 : Trigonal Planar vs Piramidal Trigonal.....	586
14. Contoh CH_4 , C_2H_4 , dan Benzena: Simetri Tinggi dan Nonpolaritas.....	586
15. Aktivitas Optik dan Kiralitas.....	587
16. Simetri dan Spektrum Molekul.....	588
17. Sintesis Literatur tentang Simetri Molekul.....	588
18. Analisis Kritis terhadap Penggunaan Simetri.....	589
19. Aplikasi Simetri dalam Kimia.....	589
20. Implikasi Pembelajaran Dasar Teori.....	590
21. Transisi ke Software yang Digunakan.....	590
8.3 Software yang Digunakan.....	591
1. Prinsip Pemilihan Software pada Praktikum 5.....	592
2. ChemCompute sebagai Platform Web Perhitungan.....	592
3. Avogadro sebagai Editor dan Visualizer Struktur Molekul.....	594
4. Jmol sebagai Viewer Molekul Tiga Dimensi.....	594
5. Symmetry Tools untuk Identifikasi Unsur Simetri dan Kelompok Titik.....	595

6. ORCA sebagai Software Perhitungan Struktur Elektronik.....	596
7. Gaussian sebagai Software Perhitungan Geometri dan Momen Dipol	597
8. Python sebagai Alat Analisis Vektor Dipol dan Data Praktikum	598
9. Perbandingan Peran Semua Software	599
10. Workflow Praktikum yang Direkomendasikan	600
11. Data Minimum yang Harus Dihasilkan.....	600
12. Contoh Format Tabel Awal	601
13. Validasi Hasil Software	602
14. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software	602
15. Etika dan Reprodusibilitas Penggunaan Software	603
16. Implikasi Pedagogis Penggunaan Software.....	604
17. Transisi ke Molekul Model	604
8.4 Molekul Model	605
1. Prinsip Pemilihan Molekul Model.....	605
2. Ringkasan Molekul Model Praktikum 5.....	606
3. H₂O sebagai Model Molekul Bengkok dan Polar	607
4. NH₃ sebagai Model Molekul Piramidal Trigonal dan Polar	608
5. BF₃ sebagai Model Trigonal Planar Nonpolar	609
6. CH₄ sebagai Model Tetrahedral Simetris	610
7. CO₂ sebagai Model Linear Simetris dan Nonpolar.....	611
8. C₂H₄ sebagai Model Molekul Planar dengan Pusat Inversi	612
9. Benzena sebagai Model Simetri Tinggi pada Sistem Aromatik.....	613
10. Perbandingan H₂O dan CO₂	614
11. Perbandingan NH₃ dan BF₃	615
12. Perbandingan CH₄, C₂H₄, dan Benzena	615
13. Data Minimum yang Harus Dikumpulkan untuk Setiap Molekul.....	616
14. Kesalahan Umum dalam Memahami Molekul Model.....	617
15. Implikasi Pemilihan Molekul Model terhadap Pembelajaran.....	617
16. Transisi ke Jalur ChemCompute.....	618
8.5 Jalur ChemCompute.....	618
1. Pengertian Jalur ChemCompute dalam Praktikum 5	619
2. Kedudukan ChemCompute dalam Pembelajaran Simetri dan Momen Dipol	619
3. Persiapan Struktur Molekul Sebelum Masuk ChemCompute	620

4. Muatan dan Multiplicity Molekul Model	621
5. Pemilihan Metode Perhitungan	622
6. Jenis Job: Optimasi Geometri dan Momen Dipol	623
7. Langkah Umum Menjalankan Jalur ChemCompute.....	624
8. Format Tabel Data dari ChemCompute	625
9. Contoh Analisis H ₂ O melalui ChemCompute	626
10. Contoh Analisis NH ₃ melalui ChemCompute	626
11. Contoh Analisis BF ₃ melalui ChemCompute	627
12. Contoh Analisis CH ₄ melalui ChemCompute.....	627
13. Contoh Analisis CO ₂ melalui ChemCompute.....	628
14. Contoh Analisis C ₂ H ₄ melalui ChemCompute	628
15. Contoh Analisis Benzena melalui ChemCompute	629
16. Validasi Output ChemCompute	629
17. Menafsirkan Nilai Momen Dipol Mendekati Nol	630
18. Format Penyimpanan Output ChemCompute	631
19. Hubungan Jalur ChemCompute dengan Jalur Python Mandiri.....	631
20. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute.....	632
21. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	632
22. Transisi ke Jalur Python Mandiri	633
8.6 Jalur Python Mandiri	633
1. Kedudukan Python dalam Praktikum 5	634
2. Dasar Teori Perhitungan Vektor Dipol	635
3. Mengapa Pusat Massa Perlu Dihitung?	636
4. Input Koordinat Molekul	636
5. Muatan Parsial dan Keterbatasannya	637
6. Penentuan Polar atau Nonpolar Berdasarkan Ambang Dipol	638
7. Tabel Klasifikasi Kelompok Titik Manual	639
8. Struktur Kode Python yang Dianjurkan	639
9. Contoh Kode Python Jalur Mandiri	640
10. Penjelasan Bagian Kode	645
11. Fungsi Pusat Massa.....	646
12. Fungsi Vektor Dipol.....	647
13. Fungsi Klasifikasi Polaritas.....	647

14. Output Tabel Hasil Analisis	648
15. Visualisasi Vektor Dipol	648
16. Grafik Batang Momen Dipol	649
17. Hubungan Hasil Python dengan Hasil ChemCompute	649
18. Contoh Analisis Hasil Python	650
19. Validasi Input Python	650
20. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri	651
21. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri	651
22. Transisi ke Nama File Kode	652
8.7 Nama File Kode	652
1. Makna Nama File dalam Praktikum Kimia Komputasi	653
2. Alasan Menggunakan Angka 05	654
3. Alasan Menggunakan Frasa simetri_momen_dipol	655
4. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	656
5. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python	656
6. Hubungan Nama File dengan Isi Kode	657
7. Komentar Identitas pada Awal File	658
8. Letak File dalam Struktur Folder Praktikum	659
9. Hubungan Nama File Kode dengan File Input dan Output	660
10. Reprodusibilitas dan Keterlacakan Kode	660
11. Pengelolaan Versi File Kode	661
12. Cara Menjalankan File Kode	662
13. Kesesuaian Nama File dengan Praktik Pemrograman Ilmiah	663
14. Keterkaitan Nama File dengan Penilaian Praktikum	663
15. Nama File dan Integritas Akademik	664
16. Kesalahan Umum dalam Penamaan File	664
17. Standar Minimal File yang Dikumpulkan	665
18. Implikasi Pedagogis Penamaan File	665
19. Transisi ke Output Kode	666
8.8 Output Kode	666
1. Kedudukan Output Kode dalam Praktikum 5	667
2. Output Pertama: Tabel Molekul, Kelompok Titik, dan Momen Dipol	667
3. Komponen μ_x , μ_y , μ_z , dan μ Total	668

4. Output Kedua: Visualisasi Vektor Dipol	669
5. Kriteria Visualisasi Vektor Dipol yang Baik	670
6. Output Ketiga: Klasifikasi Polar/Nonpolar	671
7. Output Keempat: File CSV Hasil Analisis	672
8. Kriteria File CSV yang Baik	673
9. Output Kelima: Grafik Batang Momen Dipol	674
10. Kriteria Grafik Batang yang Baik	674
11. Folder Output yang Dianjurkan	675
12. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum	676
13. Validasi Output Kode	676
14. Menafsirkan Nilai Momen Dipol Kecil	677
15. Membandingkan Output Python dengan Output ChemCompute	678
16. Kesalahan Umum dalam Output Kode	679
17. Pemeriksaan Akhir Output Kode	679
18. Implikasi Ilmiah Output Kode	680
19. Implikasi Pedagogis Output Kode	680
20. Transisi ke Analisis	681
8.9 Analisis	681
1. Makna Analisis Simetri dan Momen Dipol	681
2. Dasar Teoretis: Momen Dipol sebagai Vektor	682
3. Latar Historis Konsep Simetri dalam Kimia	683
4. Prinsip Umum: Molekul Simetris dan Momen Dipol Nol	684
5. Prinsip Umum: Molekul Bengkok atau Piramidal dan Momen Dipol Tidak Nol	684
6. Analisis H ₂ O: Molekul Bengkok dan Polar	685
7. Analisis NH ₃ : Molekul Piramidal Trigonal dan Polar	686
8. Analisis CO ₂ : Ikatan Polar tetapi Molekul Nonpolar	686
9. Analisis BF ₃ : Trigonal Planar dan Nonpolar	687
10. Analisis CH ₄ : Simetri Tetrahedral dan Momen Dipol Nol	688
11. Analisis C ₂ H ₄ : Molekul Planar dengan Pusat Inversi	689
12. Analisis Benzena: Simetri Aromatik Tinggi dan Nonpolaritas	689
13. Membaca Hasil Grafik Batang Momen Dipol	690
14. Membaca Visualisasi Vektor Dipol	690
15. Perbandingan Hasil Python dan ChemCompute	691

16. Analisis Kritis: Simetri Ideal vs Struktur Nyata.....	692
17. Analisis Kritis: Polaritas Bukan Satu-Satunya Ukuran Reaktivitas.....	692
18. Hubungan Simetri dengan Spektrum Molekul.....	693
19. Hubungan Simetri dengan Aktivitas Optik.....	694
20. Struktur Analisis yang Dianjurkan dalam Laporan	694
21. Kesalahan Umum dalam Analisis.....	695
22. Implikasi Keilmuan Analisis Simetri dan Momen Dipol.....	695
23. Implikasi Pedagogis Praktikum 5.....	696
24. Transisi ke Pertanyaan Diskusi	696
8.10 Pertanyaan Diskusi	697
1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum 5	697
2. Petunjuk Umum Menjawab Pertanyaan Diskusi.....	698
3. Pertanyaan Diskusi 1: Mengapa CO ₂ Nonpolar sedangkan H ₂ O Polar?.....	699
4. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 1.....	700
5. Pertanyaan Diskusi 2: Mengapa BF ₃ Nonpolar?	701
6. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 2.....	701
7. Pertanyaan Diskusi 3: Apa Hubungan Simetri dengan Polaritas?	702
8. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 3.....	703
9. Pertanyaan Diskusi 4: Bagaimana Simetri Memengaruhi Spektrum Molekul?	704
10. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 4.....	706
11. Hubungan Empat Pertanyaan Diskusi.....	706
12. Contoh Jawaban Terintegrasi.....	707
13. Rubrik Penilaian Jawaban Diskusi	708
14. Kesalahan Umum dalam Menjawab Pertanyaan Diskusi.....	708
15. Implikasi Keilmuan Pertanyaan Diskusi	709
16. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi.....	709
17. Transisi ke Penutup Bab 8	709
Penutup Bab 8	710
Rangkuman Bab 8.....	711
Sintesis Gagasan Utama Bab 8	712
Implikasi Keilmuan Bab 8.....	712
Implikasi Praktis Bab 8.....	713
Keterbatasan Pembahasan Bab 8.....	714

Arah Menuju Bab Berikutnya	714
Daftar Pustaka Bab 8.....	715
BAB 9	717
PRAKTIKUM 6: FREKUENSI VIBRASI DAN SPEKTRUM IR KOMPUTASI.....	717
Pengantar Bab 9.....	717
9.1 Tujuan Praktikum	718
1. Memahami Frekuensi Vibrasi sebagai Gerak Molekul.....	719
2. Memahami Mode Normal Molekul	719
3. Menghitung Frekuensi Vibrasi melalui Perhitungan Komputasi	720
4. Mengenali Intensitas IR.....	721
5. Menafsirkan Spektrum IR Hasil Komputasi	722
6. Memahami Frekuensi Imajiner sebagai Validasi Struktur	722
7. Memahami Faktor Skala pada Frekuensi Komputasi	723
8. Membandingkan Spektrum Dua Molekul.....	724
9. Molekul Model sebagai Sarana Mencapai Tujuan Praktikum.....	724
10. Indikator Keberhasilan Praktikum.....	725
11. Sikap Ilmiah yang Diharapkan.....	726
12. Implikasi Pembelajaran Praktikum 6.....	726
13. Transisi ke Dasar Teori	727
9.2 Dasar Teori	727
1. Vibrasi Molekul sebagai Gerak di Sekitar Posisi Keseimbangan.....	728
2. Bilangan Gelombang dalam Spektroskopi IR	729
3. Mode Normal Molekul.....	730
4. Jenis-Jenis Gerak Vibrasi	731
5. Frekuensi Harmonik	732
6. Matriks Hessien dan Makna Kelengkungan Energi	733
7. Intensitas IR.....	733
8. Perbedaan Momen Dipol Permanen dan Perubahan Momen Dipol.....	734
9. Frekuensi Imajiner.....	735
10. Frekuensi Imajiner dan Validasi Geometri.....	736
11. Hubungan Kekuatan Ikatan dengan Frekuensi Vibrasi	736
12. Hubungan Massa Atom dengan Frekuensi Vibrasi	737
13. Gugus Fungsi dan Daerah IR	738

14. Faktor Skala Frekuensi Komputasi	739
15. Spektrum IR Simulasi.....	740
16. Identifikasi Puncak Utama	740
17. Analisis Kritis terhadap Spektrum IR Komputasi.....	741
18. Aplikasi Frekuensi Vibrasi dan Spektrum IR Komputasi.....	741
19. Sintesis Teori untuk Praktikum 6	742
20. Transisi ke Software yang Digunakan	742
9.3 Software yang Digunakan	743
1. Prinsip Pemilihan Software pada Praktikum 6.....	744
2. ChemCompute sebagai Jalur Berbasis Web	745
3. GAMESS sebagai Paket Kimia Kuantum	746
4. ORCA untuk Optimasi dan Frekuensi Vibrasi.....	746
5. Gaussian untuk Perhitungan Frekuensi dan Analisis IR.....	747
6. Avogadro untuk Pembuatan Struktur Molekul.....	748
7. GaussView untuk Visualisasi Struktur dan Mode Normal.....	749
8. Molden untuk Membaca Output dan Mode Vibrasi	750
9. Python untuk Simulasi Spektrum IR dan Analisis Data	751
10. Hubungan Antara Software Komputasi dan Software Visualisasi	752
11. Alur Kerja Software Praktikum 6.....	752
12. Contoh Alur Praktikum untuk Aseton	753
13. Contoh Alur Praktikum untuk Etanol.....	754
14. Kriteria Output Software yang Baik.....	754
15. Validasi Sebelum Analisis IR	755
16. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software	755
17. Etika dan Reprodusibilitas Penggunaan Software	756
18. Implikasi Pedagogis Penggunaan Software	757
19. Transisi ke Molekul Model.....	758
9.4 Molekul Model	758
1. Prinsip Pemilihan Molekul Model.....	759
2. Ringkasan Molekul Model Praktikum 6.....	760
3. H₂O sebagai Model Vibrasi O–H dan Molekul Bengkok	760
4. CO₂ sebagai Model Molekul Linear dan Aktivitas IR.....	762
5. NH₃ sebagai Model Vibrasi N–H dan Molekul Piramidal.....	763

6. Formaldehida sebagai Model Karbonil Sederhana	764
7. Etanol sebagai Model O–H, C–H, dan C–O dalam Molekul Organik	765
8. Aseton sebagai Model Karbonil Keton	766
9. Perbandingan Molekul Kecil dan Molekul Organik	767
10. Perbandingan H ₂ O dan CO ₂	768
11. Perbandingan Formaldehida dan Aseton	769
12. Perbandingan Etanol dan Aseton	769
13. Data Minimum untuk Setiap Molekul Model	770
14. Kesalahan Umum dalam Memahami Molekul Model	771
15. Implikasi Pemilihan Molekul Model terhadap Pembelajaran	771
16. Transisi ke Jalur ChemCompute	772
9.5 Jalur ChemCompute	772
1. Kedudukan Jalur ChemCompute dalam Praktikum 6	773
2. Persiapan Struktur Molekul	774
3. Pengaturan Muatan dan Multiplicity	775
4. Pemilihan Metode dan Basis Set	775
5. Jenis Job: Optimasi Geometri dan Frekuensi	776
6. Langkah Umum Menjalankan Jalur ChemCompute	777
7. Output yang Harus Diunduh dari ChemCompute	778
8. Membaca Frekuensi Vibrasi dari Output	779
9. Membaca Intensitas IR dari Output	779
10. Pemeriksaan Frekuensi Imajiner	780
11. Membaca Mode Normal	781
12. Penerapan Faktor Skala Setelah Data Diunduh	781
13. Contoh Jalur ChemCompute untuk H ₂ O	782
14. Contoh Jalur ChemCompute untuk CO ₂	782
15. Contoh Jalur ChemCompute untuk Formaldehida dan Aseton	783
16. Contoh Jalur ChemCompute untuk Etanol	783
17. Tabel Rekap Data ChemCompute	784
18. Validasi Hasil ChemCompute	785
19. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute	785
20. Keterbatasan Jalur ChemCompute	786
21. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	786

22. Transisi ke Jalur Python Mandiri	787
9.6 Jalur Python Mandiri	787
1. Kedudukan Python dalam Praktikum 6	788
2. Data Input: Frekuensi Vibrasi dan Intensitas IR	788
3. Frekuensi Komputasi dan Frekuensi Terkoreksi	789
4. Spektrum IR Simulasi	790
5. Identifikasi Puncak Utama.....	791
6. Perbandingan Spektrum Dua Molekul	791
7. Struktur Kode Python yang Dianjurkan	792
8. Contoh Kode Python Jalur Mandiri	793
9. Penjelasan Bagian Kode	797
10. Fungsi Faktor Skala.....	798
11. Fungsi Spektrum Gaussian	798
12. Fungsi Identifikasi Puncak Utama	799
13. Fungsi Penugasan Awal Daerah IR.....	799
14. Output Tabel Frekuensi dan Intensitas	800
15. Output Spektrum IR Simulasi	800
16. Output Perbandingan Spektrum Dua Molekul.....	801
17. File CSV Hasil Analisis.....	801
18. Validasi Data Sebelum Menggunakan Python	802
19. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri.....	802
20. Analisis Kritis terhadap Hasil Python	803
21. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri.....	803
22. Transisi ke Nama File Kode.....	804
9.7 Nama File Kode.....	804
1. Makna Nama File dalam Praktikum 6	805
2. Alasan Menggunakan Angka 06.....	806
3. Alasan Menggunakan Frasa spektrum_ir	806
4. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python.....	807
5. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	808
6. Hubungan Nama File dengan Isi Kode	808
7. Metadata di Awal File.....	809
8. Letak File dalam Struktur Folder	810

9. Hubungan Nama File Kode dengan File Input	811
10. Hubungan Nama File Kode dengan File Output	811
11. Reprodusibilitas dan Keterlacakan	812
12. Cara Menjalankan File Kode.....	813
13. Pengelolaan Versi File	813
14. Standar Minimal Isi File yang Dikumpulkan.....	814
15. Hubungan Nama File dengan Penilaian Praktikum.....	815
16. Integritas Akademik dalam File Kode	815
17. Kesalahan Umum dalam Penamaan File.....	816
18. Implikasi Pedagogis Penamaan File.....	816
19. Transisi ke Output Kode	817
9.8 Output Kode.....	817
1. Makna Output Kode dalam Praktikum 6.....	818
2. Struktur Folder Output.....	819
3. Output 1: Tabel Frekuensi dan Intensitas	819
4. Makna Frekuensi dalam Tabel Output	820
5. Makna Intensitas IR dalam Tabel Output.....	821
6. Output 2: Spektrum IR Simulasi.....	822
7. Spektrum IR H₂O.....	823
8. Spektrum IR CO₂.....	823
9. Spektrum IR NH₃.....	824
10. Spektrum IR Formaldehida	824
11. Spektrum IR Etanol.....	825
12. Spektrum IR Aseton	826
13. Output 3: Daftar Puncak Utama	826
14. Output 4: Spektrum Setelah Koreksi Faktor Skala.....	827
15. Mengapa Spektrum Terkoreksi Diperlukan	828
16. Output 5: File CSV Hasil Analisis	828
17. Hubungan Output CSV dengan Laporan Praktikum	829
18. Perbandingan Spektrum sebagai Output Tambahan.....	830
19. Validasi Output Kode	830
20. Kesalahan Umum pada Output Kode.....	831
21. Analisis Kritis terhadap Output Kode	831

22. Kriteria Output yang Layak Dimasukkan ke Laporan.....	832
23. Contoh Narasi untuk Laporan Praktikum	832
24. Implikasi Pedagogis Output Kode.....	833
25. Transisi ke Analisis	833
9.9 Analisis	834
1. Pengertian Analisis Puncak IR	835
2. Dasar Teoretis Hubungan Ikatan dan Frekuensi Vibrasi.....	835
3. Latar Historis Interpretasi Spektrum IR	836
4. Prinsip Umum Penugasan Puncak IR.....	837
5. Analisis Ikatan O–H	838
6. Analisis Ikatan N–H.....	839
7. Analisis Ikatan C–H.....	839
8. Analisis Ikatan C=O	840
9. Analisis Ikatan C–O.....	841
10. Analisis H ₂ O: O–H Stretching dan H–O–H Bending	841
11. Analisis CO ₂ : Mode Linear dan Aktivitas IR.....	842
12. Analisis NH ₃ : N–H Stretching dan Bending	843
13. Analisis Formaldehida: Karbonil Sederhana	843
14. Analisis Etanol: O–H, C–H, dan C–O.....	844
15. Analisis Aseton: C=O Keton dan Mode CH ₃	845
16. Perbandingan Etanol dan Aseton.....	845
17. Perbandingan Formaldehida dan Aseton	846
18. Hubungan Intensitas C=O dengan Perubahan Momen Dipol.....	847
19. Hubungan O–H dengan Frekuensi Tinggi.....	847
20. Hubungan C–O dan C=O.....	848
21. Daerah Fingerprint dan Keterbatasan Penugasan	848
22. Analisis Frekuensi Imajiner sebelum Interpretasi Puncak.....	849
23. Analisis Frekuensi Komputasi dan Faktor Skala	849
24. Analisis Kritis terhadap Spektrum Komputasi.....	850
25. Format Analisis dalam Laporan Praktikum	850
26. Kesalahan Umum dalam Analisis Puncak IR	851
27. Implikasi Keilmuan Analisis IR.....	852
28. Implikasi Pedagogis Analisis Puncak IR	852

29. Transisi ke Pertanyaan Diskusi	853
9.10 Pertanyaan Diskusi	853
1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum 6	854
2. Prinsip Umum Menjawab Pertanyaan Diskusi	854
3. Pertanyaan Diskusi 1: Apa Arti Frekuensi Imajiner?	855
4. Frekuensi Imajiner sebagai Alat Validasi Geometri	856
5. Contoh Kasus Frekuensi Imajiner	857
6. Pertanyaan Diskusi 2: Mengapa O–H Muncul pada Frekuensi Tinggi?	857
7. O–H dalam H ₂ O dan Etanol	858
8. Hubungan O–H dengan Ikatan Hidrogen	859
9. Pertanyaan Diskusi 3: Mengapa C=O Sering Muncul Kuat pada IR?	859
10. C=O pada Formaldehida dan Aseton	860
11. Perbedaan Frekuensi dan Intensitas pada C=O	861
12. Pertanyaan Diskusi 4: Mengapa Frekuensi Komputasi Perlu Faktor Skala?	862
13. Penyebab Perbedaan Frekuensi Komputasi dan Eksperimen	862
14. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 4	863
15. Hubungan Empat Pertanyaan Diskusi	864
16. Contoh Jawaban Terintegrasi	864
17. Rubrik Penilaian Jawaban Diskusi	865
18. Kesalahan Umum dalam Menjawab Pertanyaan Diskusi	865
19. Implikasi Keilmuan Pertanyaan Diskusi	866
20. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi	866
21. Sintesis Akhir Pertanyaan Diskusi Praktikum 6	867
22. Transisi ke Penutup Bab 9	867
Penutup Bab 9	868
Rangkuman Bab 9	869
Sintesis Gagasan Utama Bab 9	870
Implikasi Keilmuan Bab 9	870
Implikasi Praktis Bab 9	871
Keterbatasan Pembahasan Bab 9	872
Arah Menuju Bab Berikutnya	872
Daftar Pustaka Bab 9	873
BAB 10	875

PRAKTIKUM 7: ENERGI REAKSI, TERMODINAMIKA, DAN EFEK PELARUT	875
10.1 Tujuan Praktikum	875
1. Makna Energi Reaksi dalam Kimia Komputasi	876
2. Memahami Perbedaan Energi Elektronik, Entalpi, dan Energi Bebas Gibbs	876
3. Tujuan Memahami Zero-Point Energy	877
4. Tujuan Memahami Entropi dan Spontanitas.....	878
5. Tujuan Memahami Pengaruh Pelarut	879
6. Sistem Reaksi Model sebagai Sarana Pencapaian Tujuan.....	879
7. Tujuan Operasional Praktikum	880
8. Tujuan Menggunakan Metode yang Konsisten	881
9. Tujuan Menguasai Konversi Satuan Energi	881
10. Tujuan Membandingkan Fase Gas dan Pelarut	882
11. Tujuan Membaca Diagram Energi Reaksi.....	883
12. Tujuan Menghubungkan Praktikum 7 dengan Bab Sebelumnya	883
13. Analisis Kritis yang Diharapkan	884
14. Implikasi Keilmuan Praktikum 7.....	884
15. Implikasi Praktis bagi Mahasiswa.....	885
16. Indikator Keberhasilan Praktikum.....	885
17. Transisi ke Dasar Teori	886
10.2 Dasar Teori.....	886
1. Energi Elektronik.....	887
2. Makna Kestabilan Relatif Berdasarkan Energi Elektronik	888
3. Konversi Satuan Hartree ke kJ/mol.....	889
4. Zero-Point Energy.....	890
5. ZPE dalam Konteks Praktikum 7	890
6. Entalpi.....	891
7. Entalpi dan Energi Reaksi	892
8. Entropi	892
9. Energi Bebas Gibbs.....	893
10. Mengapa ΔE Tidak Selalu Sama dengan ΔG	894
11. Energi Bebas Gibbs dan Kestimbangan.....	895
12. Model Pelarut dalam Kimia Komputasi.....	895
13. Model Pelarut Kontinu	896

14. Peran Konstanta Dielektrik	897
15. Efek Pelarut terhadap Spesies Bermuatan	897
16. Efek Pelarut terhadap Spesies Polar dan Ikatan Hidrogen	898
17. Energi Solvasi	898
18. Keadaan Standar dan Koreksi Larutan	899
19. Sistem Reaksi Model dalam Perspektif Teori	899
20. Contoh Teoretis: Isomerisasi cis-trans 2-butena.....	900
21. Contoh Teoretis: Dimer Air	900
22. Contoh Teoretis: Asam Asetat Monomer dan Dimer	901
23. Analisis Kritis terhadap Termodinamika Komputasi	901
24. Prinsip Praktis Menggunakan Dasar Teori dalam Laporan	902
25. Sintesis Dasar Teori Praktikum 7.....	903
26. Transisi ke Software yang Digunakan	904
10.3 Software yang Digunakan	904
1. Prinsip Pemilihan Software.....	905
2. Tabel Peran Software dalam Praktikum 7	906
3. ChemCompute sebagai Jalur Berbasis Web	906
4. GAMESS untuk Perhitungan Energi dan Termokimia	907
5. ORCA untuk Energi, Frekuensi, dan Model Pelarut	908
6. Gaussian untuk Energi Reaksi, Termokimia, dan Pelarut	909
7. Psi4 untuk Perhitungan Energi Berbasis Skrip	910
8. PySCF untuk Eksperimen Struktur Elektronik Berbasis Python.....	911
9. Python sebagai Alat Analisis Data Energi	911
10. Mengapa Python Penting dalam Praktikum 7	912
11. Konsistensi Level Teori dalam Semua Software	913
12. Data yang Harus Diambil dari Output Software	914
13. Validasi Output Sebelum Analisis	914
14. Software dan Efek Pelarut	915
15. Keterbatasan Software dalam Model Pelarut	915
16. Hubungan Software dengan Sistem Reaksi Model	916
17. Contoh Alur Software untuk Isomerisasi cis-trans 2-butena.....	916
18. Contoh Alur Software untuk Protonasi Amonia.....	917
19. Contoh Alur Software untuk Dimer Air dan Dimer Asam Asetat	918

20. Integrasi Output Software dengan Python	918
21. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software	919
22. Etika dan Reprodusibilitas Penggunaan Software	920
23. Implikasi Pedagogis Penggunaan Software	921
24. Transisi ke Sistem Reaksi Model	921
10.4 Sistem Reaksi Model	921
1. Prinsip Pemilihan Sistem Reaksi Model	923
2. Ringkasan Sistem Reaksi Model	923
3. Isomerisasi cis-trans 2-butena	924
4. Catatan Kritis pada Isomerisasi cis-trans 2-butena	925
5. Protonasi Amonia	926
6. Catatan Kritis pada Protonasi Amonia	926
7. Hidrasi Formaldehida	927
8. Catatan Kritis pada Hidrasi Formaldehida	928
9. Dimer Air	929
10. Catatan Kritis pada Dimer Air	930
11. Konformer Etanol	931
12. Catatan Kritis pada Konformer Etanol	931
13. Asam Asetat Monomer dan Dimer	932
14. Catatan Kritis pada Dimer Asam Asetat	933
15. Perbandingan Sistem Isomer, Konformer, dan Reaksi	934
16. Muatan dan Multiplicity Sistem Model	934
17. Hubungan Sistem Model dengan ΔE , ΔH , dan ΔG	935
18. Peran Fase Gas dan Pelarut pada Sistem Model	936
19. Format Data Awal untuk Semua Sistem Model	936
20. Kesalahan Umum pada Sistem Reaksi Model	937
21. Implikasi Keilmuan Pemilihan Sistem Model	937
22. Implikasi Pedagogis Sistem Reaksi Model	938
23. Transisi ke Jalur ChemCompute	939
10.5 Jalur ChemCompute	939
1. Kedudukan Jalur ChemCompute dalam Praktikum 7	940
2. Prinsip Konsistensi Metode	941
3. Menyiapkan Struktur Reaktan dan Produk	942

4. Menentukan Muatan dan Multiplicity.....	942
5. Memilih Metode dan Basis Set.....	943
6. Memilih Jenis Job: Opt, Freq, atau Opt Freq.....	944
7. Memeriksa Status Optimasi.....	945
8. Memeriksa Frekuensi Imajiner	945
9. Mengambil Energi Elektronik dari Output.....	946
10. Mengambil Entalpi dari Output.....	947
11. Mengambil Energi Bebas Gibbs dari Output.....	947
12. Menghitung ΔE Berdasarkan Output ChemCompute	948
13. Menghitung ΔH Berdasarkan Output ChemCompute.....	949
14. Menghitung ΔG Berdasarkan Output ChemCompute.....	949
15. Konversi Hartree ke kJ/mol.....	950
16. Jalur ChemCompute untuk Isomerisasi cis-trans 2-butena	951
17. Jalur ChemCompute untuk Protonasi Amonia	951
18. Jalur ChemCompute untuk Hidrasi Formaldehida	952
19. Jalur ChemCompute untuk Dimer Air.....	952
20. Jalur ChemCompute untuk Konformer Etanol.....	953
21. Jalur ChemCompute untuk Asam Asetat Monomer dan Dimer.....	953
22. Perhitungan Fase Gas dan Pelarut.....	954
23. Format Tabel Data dari ChemCompute.....	955
24. Menyimpan Output ChemCompute.....	956
25. Validasi Akhir Sebelum Menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG	956
26. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute	957
27. Analisis Kritis terhadap Jalur ChemCompute.....	957
28. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute	958
29. Transisi ke Jalur Python Mandiri	959
10.6 Jalur Python Mandiri	959
1. Kedudukan Python dalam Praktikum 7	960
2. Prinsip Dasar Perhitungan Energi Reaksi.....	960
3. Konvensi Tanda dalam ΔE , ΔH , dan ΔG	961
4. Data Input yang Dibutuhkan Python.....	962
5. Contoh Format CSV Input.....	963
6. Konversi Hartree ke kJ/mol.....	963

7. Struktur Kode Python yang Dianjurkan	964
8. Contoh Kode Python Jalur Mandiri	964
9. Penjelasan Bagian Impor Pustaka.....	971
10. Penjelasan Konstanta Konversi.....	971
11. Penjelasan Validasi Kolom Input	972
12. Penjelasan Fungsi hitung_delta_per_grup	972
13. Penjelasan Output Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG	973
14. Penjelasan Perbandingan Fase Gas dan Pelarut.....	973
15. Diagram Energi Reaksi	974
16. Diagram Energi Bukan Diagram Kinetika.....	975
17. Contoh Analisis untuk cis-trans 2-butena.....	975
18. Contoh Analisis untuk Dimer Air.....	976
19. Contoh Analisis untuk Protonasi Amonia	977
20. Contoh Analisis untuk Hidrasi Formaldehida	977
21. Contoh Analisis untuk Konformer Etanol.....	978
22. Contoh Analisis untuk Dimer Asam Asetat.....	978
23. Validasi Data Sebelum Menjalankan Python.....	979
24. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri.....	979
25. Analisis Kritis terhadap Hasil Python	980
26. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri.....	980
27. Output yang Harus Dihasilkan dari Jalur Python.....	981
28. Transisi ke Nama File Kode.....	981
10.7 Nama File Kode.....	982
1. Makna Nama File dalam Praktikum 7	982
2. Alasan Menggunakan Angka 07.....	983
3. Alasan Menggunakan Frasa energi_reaksi_termodinamika	984
4. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah	984
5. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python.....	985
6. Hubungan Nama File dengan Isi Kode	985
7. Metadata yang Dianjurkan di Awal File	986
8. Hubungan Nama File dengan Input Data.....	987
9. Hubungan Nama File dengan Output Kode.....	988
10. Struktur Folder yang Dianjurkan	988

11. Reprodusibilitas dan Keterlacakan File.....	989
12. Versi File Selama Pengerjaan	990
13. Cara Menjalankan File.....	991
14. Catatan Teknis untuk Windows	991
15. Standar Minimal Isi File yang Dikumpulkan.....	992
16. Daftar Periksa Sebelum Pengumpulan	992
17. Hubungan Nama File dengan Penilaian Praktikum.....	993
18. Kesalahan Umum dalam Penamaan File.....	993
19. Integritas Akademik dan File Kode	994
20. Implikasi Pedagogis Penamaan File.....	995
21. Transisi ke Output Kode	995
10.8 Output Kode	995
1. Makna Output Kode dalam Praktikum 7.....	996
2. Struktur Folder Output.....	997
3. Output 1: Tabel Energi Reaktan dan Produk.....	998
4. Fungsi Kolom Koefisien dalam Tabel Energi.....	999
5. Validasi Tabel Energi Reaktan dan Produk.....	1000
6. Output 2: Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG	1000
7. Makna ΔE dalam Output	1001
8. Makna ΔH dalam Output.....	1001
9. Makna ΔG dalam Output.....	1002
10. Perbandingan ΔE , ΔH , dan ΔG dalam Satu Tabel	1003
11. Output 3: Diagram Energi Reaksi.....	1003
12. Diagram Energi Reaksi sebagai Visualisasi Termodinamika	1004
13. Batasan Diagram Energi Reaksi.....	1004
14. Output 4: Grafik Perbandingan Fase Gas dan Pelarut.....	1005
15. Makna Perbandingan Fase Gas dan Pelarut.....	1006
16. Pelarut Tidak Selalu Menstabilkan Produk	1006
17. Output 5: File CSV Hasil Analisis	1007
18. Hubungan CSV dengan Laporan Praktikum.....	1007
19. Output untuk Sistem cis-trans 2-butena	1008
20. Output untuk Protonasi Amonia	1009
21. Output untuk Hidrasi Formaldehida	1009

22. Output untuk Dimer Air	1010
23. Output untuk Konformer Etanol	1010
24. Output untuk Asam Asetat Monomer dan Dimer	1011
25. Validasi Output Kode	1011
26. Kesalahan Umum pada Output Kode	1012
27. Analisis Kritis terhadap Output	1012
28. Kriteria Output yang Layak Masuk Laporan	1013
29. Contoh Narasi Output untuk Laporan	1013
30. Implikasi Pedagogis Output Kode	1014
31. Transisi ke Analisis	1014
10.9 Analisis	1015
1. Pengertian Analisis Termodinamika Komputasi	1015
2. Latar Historis Analisis Energi Reaksi	1016
3. Energi Elektronik sebagai Lapisan Pertama Analisis	1017
4. Keterbatasan Energi Elektronik	1018
5. Entalpi sebagai Lapisan Kedua Analisis	1019
6. Perbedaan ΔE dan ΔH	1019
7. Energi Bebas Gibbs sebagai Kriteria Termodinamika	1020
8. Peran Entropi dalam Perbedaan ΔH dan ΔG	1021
9. Analisis Isomerisasi cis-trans 2-butena	1022
10. Analisis Protonasi Amonia	1022
11. Analisis Hidrasi Formaldehida	1023
12. Analisis Dimer Air	1024
13. Analisis Konformer Etanol	1024
14. Analisis Asam Asetat Monomer dan Dimer	1025
15. Peran Pelarut dalam Menstabilkan Spesies Polar atau Bermuatan	1026
16. Model Pelarut Kontinu dalam Analisis	1026
17. Pelarut Tidak Selalu Menstabilkan Produk	1027
18. Analisis Perbandingan Fase Gas dan Pelarut	1028
19. Analisis Hubungan Energi dan Stoikiometri	1028
20. Analisis Hubungan Termodinamika dan Kinetika	1029
21. Analisis Kritis terhadap Data Komputasi	1029
22. Analisis Kritis terhadap Entropi pada Reaksi Asosiasi	1030

23. Analisis Kritis terhadap Model Pelarut Kontinu	1030
24. Format Analisis dalam Laporan Praktikum	1031
25. Kesalahan Umum dalam Analisis.....	1032
26. Implikasi Keilmuan Analisis Praktikum 7	1032
27. Implikasi Pedagogis Analisis.....	1033
28. Sintesis Analisis Praktikum 7.....	1033
29. Transisi ke Pertanyaan Diskusi	1034
10.10 Pertanyaan Diskusi	1034
1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum 7	1035
2. Prinsip Umum Menjawab Pertanyaan Diskusi.....	1036
3. Latar Historis Pertanyaan Diskusi.....	1036
4. Pertanyaan Diskusi 1: Mengapa ΔE Tidak Selalu Sama dengan ΔG ?.....	1037
5. Contoh ΔE dan ΔG pada Dimer Air.....	1037
6. Contoh ΔE dan ΔG pada Dimer Asam Asetat.....	1038
7. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 1.....	1039
8. Pertanyaan Diskusi 2: Apa Peran Entropi dalam Spontanitas Reaksi?	1039
9. Entropi pada Reaksi Asosiasi.....	1040
10. Entropi pada Hidrasi Formaldehida.....	1041
11. Entropi dan Suhu.....	1041
12. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 2.....	1042
13. Pertanyaan Diskusi 3: Mengapa Pelarut Dapat Menurunkan Energi Spesies Bermuatan?	1042
14. Contoh Protonasi Amonia dan Stabilisasi NH_4^+	1043
15. Pelarut Polar dan Konstanta Dielektrik	1044
16. Pelarut dan Stabilisasi Relatif.....	1044
17. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 3.....	1045
18. Pertanyaan Diskusi 4: Apa Keterbatasan Model Pelarut Kontinu?	1045
19. Keterbatasan 1: Tidak Menampilkan Molekul Pelarut Eksplisit	1046
20. Keterbatasan 2: Ikatan Hidrogen Spesifik Tidak Selalu Tertangkap	1047
21. Keterbatasan 3: Dinamika Pelarut Tidak Digambarkan.....	1047
22. Keterbatasan 4: Bergantung pada Rongga dan Parameter	1047
23. Keterbatasan 5: Keadaan Standar dan Konsentrasi	1048
24. Keterbatasan 6: Reaksi Ionik dan Proton Bebas	1048

25. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 4.....	1049
26. Hubungan Empat Pertanyaan Diskusi.....	1049
27. Contoh Jawaban Terintegrasi.....	1050
28. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi.....	1050
29. Kesalahan Umum dalam Menjawab Pertanyaan Diskusi.....	1051
30. Implikasi Keilmuan Pertanyaan Diskusi	1052
31. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi	1052
32. Sintesis Akhir Pertanyaan Diskusi Praktikum 7.....	1053
33. Transisi ke Penutup Bab 10	1053
Penutup Bab 10	1054
Rangkuman Bab 10.....	1054
Sintesis Alur Praktikum 7	1056
Makna Sistem Reaksi Model dalam Bab 10	1056
Keterampilan yang Diperoleh Mahasiswa.....	1057
Keterbatasan Praktikum 7	1058
Implikasi Keilmuan Bab 10.....	1058
Implikasi Pedagogis Bab 10	1059
Arah Menuju Bab Berikutnya	1059
Kesimpulan Umum Bab 10	1060
Daftar Pustaka Bab 10.....	1061
GLOSARIUM	1063

BAGIAN 2

MATERI PRAKTIKUM

BAB 4

PRAKTIKUM 1: VISUALISASI FUNGSI GELOMBANG DAN PARTIKEL DALAM KOTAK

Pengantar Bab 4

Bab 4 merupakan praktikum pertama dalam buku ini. Praktikum ini dipilih sebagai pintu masuk karena model **partikel dalam kotak satu dimensi** adalah salah satu model paling sederhana, paling mendasar, dan paling kuat untuk memperkenalkan gagasan inti kimia kuantum. Melalui model ini, mahasiswa dapat melihat secara langsung bahwa energi pada skala kuantum tidak berubah secara kontinu, melainkan terkuantisasi. Mahasiswa juga dapat memvisualisasikan fungsi gelombang, rapat probabilitas, simpul, bilangan kuantum, serta pengaruh ukuran ruang terhadap energi partikel.

Model partikel dalam kotak sering dibahas dalam buku kimia kuantum klasik, seperti karya Ira N. Levine, McQuarrie, Atkins dan Friedman, serta Engel dan Reid, karena model ini menyajikan bentuk matematis yang sederhana tetapi konsekuensi konseptualnya sangat dalam. Di dalam model ini, partikel dibatasi dalam ruang tertentu dan tidak dapat berada di luar batas kotak. Dari syarat batas tersebut, muncul fungsi gelombang stasioner dan tingkat energi diskrit. Dengan kata lain, kuantisasi energi tidak diperkenalkan sebagai dogma, tetapi muncul sebagai akibat matematis dari syarat batas pada fungsi gelombang.

Secara pedagogis, praktikum ini sangat penting karena banyak mahasiswa mempelajari fungsi gelombang hanya sebagai simbol dalam persamaan Schrödinger. Mereka melihat lambang ψ , operator Hamiltonian, dan energi E , tetapi belum tentu memahami bentuk fungsi gelombang, arti ψ^2 , atau makna simpul. Melalui Python atau Jupyter Notebook, fungsi gelombang dapat diplot. Rapat probabilitas dapat digambar. Tingkat energi dapat dihitung. Perubahan panjang kotak dapat disimulasikan. Dengan demikian, konsep yang semula abstrak berubah menjadi pengalaman visual dan numerik.

Praktikum ini juga menjadi latihan awal penggunaan Python dalam buku ini. Mahasiswa akan menggunakan struktur kode yang telah disiapkan pada Bab 3: import pustaka, definisi konstanta, definisi fungsi, input data, perhitungan, tabel hasil, grafik, ekspor data, dan kesimpulan numerik. Dengan demikian, Bab 4 bukan hanya memperkenalkan konsep kuantum, tetapi juga melatih pola kerja komputasi yang akan digunakan berulang pada praktikum-praktikum berikutnya.

Dalam konteks kimia, model partikel dalam kotak memiliki keterkaitan penting dengan sistem elektron π dalam molekul terkonjugasi. Elektron π dalam rantai poliena, secara sangat sederhana, dapat dipandang sebagai partikel yang bergerak dalam ruang terbatas sepanjang kerangka konjugasi. Model ini tentu tidak menggantikan metode kimia kuantum molekuler yang lebih akurat seperti Hartree–Fock atau DFT, tetapi sangat berguna sebagai pendekatan konseptual awal. Melalui model ini, mahasiswa dapat memahami mengapa panjang sistem konjugasi memengaruhi jarak antar tingkat energi dan mengapa molekul dengan konjugasi lebih panjang cenderung menyerap cahaya pada energi lebih rendah.

Bab 4 terdiri atas beberapa bagian. Subbab 4.1 membahas tujuan praktikum. Subbab 4.2 membahas dasar teori partikel dalam kotak satu dimensi dan keterkaitannya dengan elektron π . Subbab 4.3 membahas software yang digunakan. Subbab 4.4 membahas jalur ChemCompute atau Jupyter Notebook jika tersedia. Subbab 4.5 membahas jalur Python mandiri. Subbab 4.6 menetapkan nama file kode. Subbab 4.7 menjelaskan output kode. Subbab 4.8 membahas analisis hasil. Subbab 4.9 memuat pertanyaan diskusi. Dengan urutan ini, mahasiswa diarahkan dari tujuan, teori, alat, kode, output, analisis, sampai refleksi konseptual.

4.1 Tujuan Praktikum

Tujuan praktikum adalah pernyataan kompetensi yang hendak dicapai mahasiswa setelah melaksanakan kegiatan praktikum. Dalam praktikum kimia kuantum, tujuan tidak hanya berisi daftar aktivitas teknis, seperti menjalankan kode atau membuat grafik, tetapi harus mencakup pemahaman konsep, keterampilan analisis, kemampuan interpretasi, dan kesadaran metodologis. Praktikum partikel dalam kotak bertujuan agar mahasiswa memahami hubungan antara fungsi gelombang, kuantisasi energi, rapat probabilitas, simpul, bilangan kuantum, dan ukuran sistem kuantum.

Secara umum, tujuan utama praktikum ini adalah:

1. Mahasiswa memahami konsep **kuantisasi energi** pada model partikel dalam kotak satu dimensi.
2. Mahasiswa mampu menuliskan dan memvisualisasikan **fungsi gelombang $\psi_n(x)$** untuk beberapa nilai bilangan kuantum n .
3. Mahasiswa mampu menghitung dan memvisualisasikan **rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$** .
4. Mahasiswa memahami makna **simpul** dalam fungsi gelombang dan hubungannya dengan tingkat energi.
5. Mahasiswa mampu menjelaskan hubungan antara **panjang kotak L** dan energi partikel.
6. Mahasiswa mampu menggunakan Python untuk menghitung energi E_n , membuat tabel energi, membuat grafik ψ , ψ^2 , dan grafik energi terhadap n .
7. Mahasiswa mampu mengaitkan model partikel dalam kotak dengan pemahaman awal tentang **elektron π dalam molekul terkonjugasi**.

Tujuan-tujuan tersebut sengaja disusun dari konsep paling dasar menuju aplikasi kimia. Mahasiswa pertama-tama harus memahami kuantisasi energi. Setelah itu, mahasiswa melihat bentuk fungsi gelombang. Setelah fungsi gelombang dipahami, mahasiswa mempelajari rapat probabilitas. Setelah rapat probabilitas dipahami, mahasiswa menafsirkan simpul. Setelah simpul dan energi dipahami, mahasiswa menganalisis pengaruh panjang kotak. Baru setelah itu mahasiswa diarahkan untuk menghubungkan model ini dengan elektron π pada molekul terkonjugasi. Urutan ini penting agar praktikum tidak berubah menjadi kegiatan menggambar grafik tanpa pemahaman konsep.

1. Memahami Kuantisasi Energi

Tujuan pertama adalah memahami kuantisasi energi. Kuantisasi energi berarti energi partikel dalam sistem kuantum tertentu hanya dapat memiliki nilai-nilai tertentu, bukan sembarang nilai kontinu. Dalam model partikel dalam kotak satu dimensi, energi partikel dinyatakan oleh persamaan:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

dengan $n = 1, 2, 3, \dots$, h adalah konstanta Planck, m adalah massa partikel, dan L adalah panjang kotak. Persamaan ini menunjukkan bahwa energi bergantung pada kuadrat bilangan kuantum n . Energi keadaan $n = 2$ bukan dua kali energi $n = 1$, tetapi empat kali energi $n = 1$. Energi keadaan $n = 3$ adalah sembilan kali energi $n = 1$. Hubungan kuadratik ini merupakan ciri penting sistem kuantum terbatas.

Mahasiswa perlu memahami bahwa $n = 0$ tidak diperbolehkan. Jika $n = 0$, maka fungsi gelombang menjadi nol di seluruh kotak dan probabilitas menemukan partikel di mana pun juga nol. Keadaan seperti itu tidak merepresentasikan partikel yang ada dalam kotak. Inilah salah satu pelajaran konseptual penting: keadaan energi terendah bukan nol, melainkan energi keadaan dasar. Dalam kimia kuantum, gagasan ini berkaitan dengan **zero-point energy**, yaitu fakta bahwa sistem kuantum tidak dapat memiliki energi kinetik nol sepenuhnya ketika terkurung dalam ruang terbatas.

Kuantisasi energi dalam model ini bukan asumsi yang ditempelkan dari luar. Ia muncul dari penyelesaian persamaan Schrödinger dengan syarat batas tertentu. Fungsi gelombang harus bernilai nol pada batas kotak, yaitu pada $x = 0$ dan $x = L$. Syarat batas ini hanya dapat dipenuhi oleh bentuk gelombang tertentu. Akibatnya, hanya nilai energi tertentu yang diperbolehkan. Dengan demikian, praktikum ini mengajarkan bahwa kuantisasi adalah konsekuensi dari sifat gelombang dan pembatasan ruang.

Dalam kegiatan praktikum, mahasiswa tidak hanya akan membaca persamaan E_n , tetapi menghitung nilai E_n untuk $n = 1$ sampai 5. Energi akan dihitung dalam joule dan elektronvolt. Dengan tabel energi, mahasiswa dapat melihat pola kenaikan energi. Dengan grafik energi terhadap n , mahasiswa dapat melihat bahwa energi meningkat secara kuadratik. Tujuan ini sangat penting karena banyak konsep kuantum akan lebih kuat jika mahasiswa melihatnya dalam bentuk angka dan grafik.

2. Memvisualisasikan Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$

Tujuan kedua adalah memvisualisasikan fungsi gelombang. Fungsi gelombang untuk partikel dalam kotak satu dimensi berbentuk:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

untuk $0 < x < L$. Fungsi gelombang ini memenuhi syarat bahwa $\psi = 0$ pada $x = 0$ dan $x = L$. Mahasiswa perlu memahami bahwa ψ bukan lintasan partikel. Fungsi gelombang bukan gambar

posisi partikel seperti bola kecil yang bergerak dalam kotak. Fungsi gelombang adalah fungsi matematis yang mengandung informasi tentang keadaan kuantum partikel. Dalam interpretasi Born, informasi fisik yang berhubungan dengan kemungkinan menemukan partikel diperoleh dari ψ^2 , bukan langsung dari ψ sebagai kurva biasa.

Visualisasi $\psi_n(x)$ penting karena mahasiswa dapat melihat perbedaan bentuk fungsi untuk n yang berbeda. Untuk $n = 1$, fungsi gelombang memiliki satu puncak utama dan tidak memiliki simpul internal. Untuk $n = 2$, fungsi gelombang memiliki satu simpul internal di tengah kotak. Untuk $n = 3$, terdapat dua simpul internal. Secara umum, keadaan n memiliki $n - 1$ simpul internal. Pola ini sangat penting karena simpul berkaitan dengan energi. Semakin banyak simpul, semakin tinggi energi keadaan tersebut.

Melalui Python, mahasiswa akan membuat grafik $\psi_n(x)$ untuk $n = 1$ sampai 5. Grafik ini membantu mahasiswa memahami bahwa bilangan kuantum n tidak hanya label angka, tetapi menentukan bentuk fungsi gelombang. Mahasiswa juga dapat melihat bahwa fungsi gelombang memiliki nilai positif dan negatif. Nilai positif dan negatif tersebut tidak boleh ditafsirkan sebagai probabilitas positif dan negatif. Probabilitas selalu berkaitan dengan ψ^2 , sehingga selalu tidak negatif. Ini adalah perbedaan konseptual penting yang sering menjadi sumber kesalahpahaman.

Tujuan memvisualisasikan fungsi gelombang juga memiliki nilai historis. Pada awal perkembangan mekanika kuantum, gagasan bahwa partikel memiliki sifat gelombang merupakan perubahan besar dari fisika klasik. De Broglie mengajukan hipotesis gelombang materi, Schrödinger merumuskan mekanika gelombang, dan Born memberi interpretasi probabilistik terhadap fungsi gelombang. Model partikel dalam kotak memungkinkan mahasiswa melihat inti perubahan historis itu dalam bentuk paling sederhana.

3. Memahami Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$

Tujuan ketiga adalah memahami rapat probabilitas. Dalam mekanika kuantum, ψ^2 atau $|\psi|^2$ berkaitan dengan rapat probabilitas menemukan partikel pada posisi tertentu. Untuk fungsi gelombang real seperti partikel dalam kotak satu dimensi, $|\psi|^2$ sama dengan ψ^2 . Artinya, daerah dengan nilai ψ^2 besar menunjukkan daerah dengan probabilitas relatif lebih besar untuk menemukan partikel, sedangkan daerah dengan $\psi^2 = 0$ menunjukkan daerah yang tidak mungkin ditempati partikel pada keadaan tersebut.

Mahasiswa perlu memahami bahwa rapat probabilitas tidak sama dengan lintasan. Dalam fisika klasik, partikel dalam kotak dapat dibayangkan bergerak bolak-balik dan memiliki posisi tertentu setiap saat. Dalam mekanika kuantum, deskripsi yang diberikan oleh fungsi gelombang bersifat probabilistik. Kita tidak berbicara tentang lintasan pasti partikel, tetapi tentang distribusi peluang menemukan partikel jika pengukuran dilakukan. Inilah salah satu perbedaan mendasar antara deskripsi klasik dan kuantum.

Pada keadaan $n = 1$, ψ^2 maksimum di tengah kotak dan nol pada kedua batas. Ini berarti partikel paling mungkin ditemukan di sekitar tengah kotak dan tidak mungkin ditemukan tepat pada dinding kotak. Pada keadaan $n = 2$, terdapat simpul di tengah kotak sehingga probabilitas di tengah

kotak nol. Mahasiswa dapat melihat bahwa bentuk ψ^2 berubah mengikuti n . Dengan demikian, bilangan kuantum tidak hanya menentukan energi, tetapi juga distribusi probabilitas posisi.

Dalam praktikum, mahasiswa akan membuat grafik ψ^2 untuk $n = 1$ sampai 5. Grafik ini harus dibandingkan dengan grafik ψ . Dari perbandingan tersebut, mahasiswa memahami bahwa tanda negatif pada ψ hilang ketika dikuadratkan. Mahasiswa juga dapat melihat bahwa simpul pada ψ tetap menjadi titik nol pada ψ^2 . Ini penting karena simpul memiliki makna fisik dalam probabilitas.

Tujuan ini memiliki implikasi langsung terhadap pemahaman orbital atom dan molekul. Orbital juga sering digambarkan sebagai fungsi gelombang atau representasi daerah probabilitas elektron. Jika mahasiswa memahami perbedaan ψ dan ψ^2 pada model sederhana, mereka akan lebih siap memahami orbital s, p, d, orbital molekul, HOMO, LUMO, dan peta rapat elektron pada bab-bab berikutnya.

4. Memahami Simpul dan Hubungannya dengan Energi

Tujuan keempat adalah memahami simpul. Simpul adalah titik di dalam kotak tempat fungsi gelombang bernilai nol. Pada titik simpul, rapat probabilitas juga nol, sehingga partikel tidak mungkin ditemukan di titik tersebut pada keadaan kuantum yang bersangkutan. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi, jumlah simpul internal adalah $n - 1$. Keadaan $n = 1$ tidak memiliki simpul internal. Keadaan $n = 2$ memiliki satu simpul internal. Keadaan $n = 3$ memiliki dua simpul internal, dan seterusnya.

Simpul sangat penting karena menunjukkan struktur keadaan kuantum. Semakin tinggi n , semakin banyak simpul. Semakin banyak simpul, semakin cepat fungsi gelombang berosilasi. Osilasi yang lebih cepat berhubungan dengan momentum dan energi kinetik yang lebih besar. Oleh karena itu, simpul bukan sekadar fitur visual pada grafik, tetapi memiliki hubungan mendalam dengan energi.

Dalam kimia kuantum, konsep simpul juga muncul pada orbital atom dan orbital molekul. Orbital 2s memiliki simpul radial. Orbital p memiliki simpul bidang. Orbital molekul antibonding memiliki simpul di antara inti atom. Dalam orbital molekul, keberadaan simpul antara dua atom sering berkaitan dengan sifat antibonding. Oleh karena itu, pemahaman simpul pada partikel dalam kotak menjadi bekal awal untuk memahami orbital yang lebih kompleks.

Dalam praktikum ini, mahasiswa akan diminta mengidentifikasi jumlah simpul dari grafik $\psi_n(x)$. Mahasiswa tidak hanya menulis bahwa $n = 3$ memiliki dua simpul, tetapi harus menunjukkan posisi simpul pada grafik. Dengan demikian, mahasiswa belajar membaca grafik fungsi gelombang secara aktif. Mereka juga dapat membandingkan posisi simpul dengan titik nol pada grafik ψ^2 .

5. Memahami Hubungan Panjang Kotak terhadap Energi

Tujuan kelima adalah memahami pengaruh panjang kotak L terhadap energi. Dari persamaan energi:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

terlihat bahwa energi berbanding terbalik dengan kuadrat panjang kotak. Jika L diperkecil, energi meningkat tajam. Jika L diperbesar, energi menurun. Hubungan ini sangat penting karena menunjukkan bahwa pembatasan ruang meningkatkan energi kuantum. Partikel yang dikurung dalam ruang lebih sempit memiliki energi minimum yang lebih tinggi.

Secara konseptual, hal ini berkaitan dengan prinsip ketidakpastian Heisenberg. Ketika posisi partikel dibatasi dalam ruang yang lebih sempit, ketidakpastian posisi mengecil. Akibatnya, ketidakpastian momentum meningkat. Momentum yang lebih besar berkaitan dengan energi kinetik yang lebih besar. Model partikel dalam kotak memberikan ilustrasi matematis sederhana tentang hubungan antara pembatasan ruang dan energi.

Dalam praktikum, mahasiswa akan melakukan simulasi perubahan panjang kotak. Misalnya, L diubah dari 0,5 nm, 1,0 nm, 1,5 nm, sampai 2,0 nm. Untuk setiap nilai L , energi E_1 atau beberapa tingkat energi dihitung. Mahasiswa kemudian membuat grafik energi terhadap panjang kotak. Dari grafik tersebut, mahasiswa dapat melihat bahwa energi menurun secara tidak linear ketika L bertambah. Ini melatih mahasiswa memahami hubungan fungsional, bukan sekadar menghafal persamaan.

Tujuan ini memiliki kaitan langsung dengan kimia. Dalam sistem elektron π , panjang sistem konjugasi dapat dipandang secara sederhana sebagai panjang “kotak” tempat elektron π terdelokalisasi. Semakin panjang sistem konjugasi, jarak energi antar tingkat semakin kecil. Akibatnya, energi transisi elektronik dapat menurun. Inilah salah satu alasan model partikel dalam kotak sering digunakan untuk memberi pemahaman awal tentang spektrum molekul terkonjugasi, misalnya poliena dan pewarna organik. Tentu saja, model ini sangat sederhana dan tidak memasukkan semua interaksi elektron, tetapi berguna sebagai jembatan konseptual.

6. Menguasai Keterampilan Python Dasar dalam Praktikum

Tujuan keenam adalah menguasai keterampilan Python dasar. Praktikum ini menjadi tempat pertama mahasiswa menerapkan struktur kode Bab 3 secara nyata. Mahasiswa akan menggunakan NumPy untuk membuat grid x dan menghitung nilai fungsi. Mahasiswa menggunakan pandas untuk membuat tabel energi. Mahasiswa menggunakan Matplotlib untuk membuat grafik fungsi gelombang, rapat probabilitas, dan energi. Mahasiswa juga mengeksport hasil ke CSV dan gambar.

Keterampilan Python yang dilatih meliputi:

1. Mengimpor pustaka.
2. Mendefinisikan konstanta.
3. Membuat fungsi energi E_n .
4. Membuat fungsi gelombang $\psi_n(x)$.
5. Menggunakan array NumPy.
6. Membuat tabel pandas.
7. Membuat grafik Matplotlib.
8. Menyimpan data CSV.
9. Menyimpan gambar grafik.
10. Menulis kesimpulan numerik.

Keterampilan ini akan digunakan berulang dalam bab-bab berikutnya. Pada Bab 5, mahasiswa akan menghitung parameter geometri dari koordinat. Pada Bab 7, mahasiswa akan membuat diagram HOMO-LUMO. Pada Bab 9, mahasiswa akan membuat spektrum IR simulasi. Pada Bab 10, mahasiswa akan menghitung energi reaksi. Karena itu, praktikum partikel dalam kotak bukan hanya latihan kuantum, tetapi juga latihan dasar workflow Python.

Secara pedagogis, pemilihan partikel dalam kotak sebagai praktikum pertama sangat tepat karena modelnya sederhana dan tidak memerlukan output software kimia kuantum yang panjang. Mahasiswa dapat fokus pada struktur kode, grafik, dan interpretasi. Jika langsung dimulai dari output ORCA atau GAMESS, mahasiswa mungkin terbebani oleh format file dan istilah teknis. Dengan model partikel dalam kotak, mahasiswa belajar dasar Python dalam konteks kuantum yang bersih dan terkendali.

7. Menghubungkan Model dengan Elektron π dalam Molekul Terkonjugasi

Tujuan ketujuh adalah mengaitkan model partikel dalam kotak dengan elektron π dalam molekul terkonjugasi. Hubungan ini harus dijelaskan secara hati-hati. Model partikel dalam kotak bukan representasi sempurna elektron π . Molekul nyata memiliki inti atom, interaksi elektron-elektron, potensial yang tidak benar-benar nol di dalam dan tak hingga di luar, serta struktur tiga dimensi. Namun, model ini berguna untuk memahami ide delokalisasi elektron secara sederhana.

Dalam molekul terkonjugasi, elektron π tidak terlokalisasi pada satu ikatan saja, tetapi tersebar sepanjang sistem p orbital yang tumpang tindih. Jika sistem konjugasi lebih panjang, elektron π memiliki ruang delokalisasi yang lebih besar. Dalam analogi partikel dalam kotak, panjang kotak L bertambah. Karena energi berbanding terbalik dengan L^2 , selisih energi antar tingkat menjadi lebih kecil ketika L lebih besar. Secara kualitatif, ini membantu menjelaskan mengapa molekul dengan sistem konjugasi panjang dapat menyerap cahaya dengan energi lebih rendah.

Contoh sederhana adalah perbandingan etilena, butadiena, heksatriena, dan poliena yang lebih panjang. Etilena memiliki sistem π pendek, sedangkan butadiena dan heksatriena memiliki sistem konjugasi lebih panjang. Dengan model kotak, mahasiswa dapat memprediksi bahwa peningkatan panjang sistem menurunkan jarak energi tertentu. Dalam praktik spektroskopi, hal ini berkaitan dengan pergeseran serapan elektronik ke panjang gelombang lebih besar pada sistem konjugasi yang lebih panjang. Model ini tidak menggantikan perhitungan DFT atau metode elektronik yang lebih akurat, tetapi memberi intuisi awal yang kuat.

Tujuan ini penting karena mahasiswa kimia perlu melihat bahwa model matematika sederhana dapat memiliki implikasi kimia. Partikel dalam kotak bukan sekadar soal fisika abstrak. Ia dapat menjadi pintu masuk untuk memahami warna molekul, spektrum UV-Vis, delokalisasi elektron, dan kestabilan sistem terkonjugasi. Dengan demikian, praktikum ini membangun jembatan antara kimia kuantum dasar dan kimia molekul nyata.

8. Tujuan Operasional Praktikum

Selain tujuan konseptual, praktikum ini juga memiliki tujuan operasional. Setelah menyelesaikan praktikum, mahasiswa diharapkan mampu:

1. Membuat file kode bernama `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`.
2. Menghitung energi E_n untuk $n = 1$ sampai 5.
3. Menyusun tabel energi dalam joule dan elektronvolt.
4. Membuat grafik fungsi gelombang $\psi_n(x)$.
5. Membuat grafik rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$.
6. Membuat grafik energi terhadap n .
7. Membuat simulasi perubahan panjang kotak terhadap energi.
8. Menyimpan tabel hasil dalam format CSV.
9. Menyimpan grafik dalam folder `gambar/`.
10. Menulis analisis hubungan antara n , simpul, energi, probabilitas, dan panjang kotak.

Tujuan operasional ini memastikan bahwa praktikum menghasilkan output konkret. Hasil praktikum tidak hanya berupa pemahaman verbal, tetapi juga file kode, tabel, grafik, dan analisis. File-file tersebut akan menjadi bagian dari folder praktikum:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── input/
├── output/
├── python/
│   └── praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├── gambar/
├── laporan/
└── data/
```

Walaupun praktikum ini tidak selalu memerlukan output dari software kimia kuantum seperti ORCA atau GAMESS, folder `output/` tetap dapat digunakan untuk menyimpan hasil eksekusi atau catatan output. Folder `data/` digunakan untuk file CSV. Folder `gambar/` digunakan untuk grafik. Folder `python/` digunakan untuk kode. Folder `laporan/` digunakan untuk laporan praktikum.

9. Indikator Keberhasilan Praktikum

Agar tujuan praktikum dapat dinilai, diperlukan indikator keberhasilan. Indikator keberhasilan praktikum ini meliputi aspek konseptual, numerik, visual, dan metodologis.

Dari sisi konseptual, mahasiswa berhasil jika mampu menjelaskan bahwa energi terkuantisasi karena syarat batas fungsi gelombang. Mahasiswa juga harus mampu menjelaskan mengapa $n = 0$ tidak diperbolehkan, mengapa keadaan dasar tetap memiliki energi, dan mengapa semakin tinggi n semakin banyak simpul.

Dari sisi numerik, mahasiswa berhasil jika mampu menghitung energi E_n dengan benar dalam joule dan elektronvolt. Mahasiswa juga harus mampu menunjukkan bahwa energi berbanding dengan n^2 dan berbanding terbalik dengan L^2 . Kesalahan satuan harus dihindari.

Dari sisi visual, mahasiswa berhasil jika mampu membuat grafik ψ dan ψ^2 untuk $n = 1$ sampai 5. Grafik harus memiliki label sumbu, judul, legenda, dan satuan yang sesuai. Mahasiswa juga harus mampu menunjukkan letak simpul pada grafik.

Dari sisi metodologis, mahasiswa berhasil jika kode dapat dijalankan ulang, tabel diekspor ke CSV, grafik disimpan sebagai file gambar, dan folder praktikum tersusun sesuai standar Bab 2. Jika kode hanya berjalan di komputer mahasiswa tetapi tidak dapat dijalankan oleh dosen, maka praktikum belum sepenuhnya reproduisibel.

10. Analisis Kritis terhadap Tujuan Praktikum

Tujuan praktikum ini perlu dipahami secara kritis agar mahasiswa tidak menganggap model partikel dalam kotak sebagai gambaran sempurna sistem nyata. Model ini sangat sederhana. Potensial di dalam kotak dianggap nol, sedangkan di luar kotak dianggap tak hingga. Partikel tidak berinteraksi dengan partikel lain. Sistem satu dimensi digunakan untuk menyederhanakan matematika. Elektron π dalam molekul nyata tentu lebih kompleks daripada partikel tunggal dalam kotak satu dimensi.

Namun, kesederhanaan model bukan kelemahan mutlak. Dalam pendidikan sains, model sederhana sangat penting karena membantu mahasiswa memahami prinsip dasar sebelum masuk ke sistem kompleks. Model partikel dalam kotak mengajarkan tiga prinsip besar: pembatasan ruang menyebabkan kuantisasi, fungsi gelombang menentukan distribusi probabilitas, dan ukuran sistem memengaruhi energi. Ketiga prinsip ini tetap relevan ketika mahasiswa mempelajari orbital atom, orbital molekul, ikatan kimia, spektroskopi, dan reaktivitas.

Dengan demikian, tujuan praktikum tidak boleh diarahkan untuk “membuktikan bahwa molekul nyata sama persis dengan kotak satu dimensi”, tetapi untuk membangun intuisi kuantum. Intuisi ini akan menjadi bekal ketika mahasiswa berhadapan dengan output DFT, orbital HOMO-LUMO, mode vibrasi, dan energi reaksi pada bab-bab berikutnya. Praktikum ini adalah latihan memahami bahasa dasar mekanika kuantum sebelum membaca bahasa software kimia komputasi yang lebih kompleks.

11. Implikasi Pembelajaran

Praktikum ini memiliki beberapa implikasi pembelajaran. Pertama, mahasiswa belajar bahwa konsep kuantum dapat dipelajari melalui komputasi sederhana. Mereka tidak harus menunggu software kimia kuantum kompleks untuk melihat fenomena kuantisasi. Kedua, mahasiswa belajar bahwa grafik adalah alat berpikir. Grafik ψ dan ψ^2 membantu membedakan fungsi gelombang dan probabilitas. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa ukuran sistem memengaruhi energi. Keempat, mahasiswa mulai menggunakan Python sebagai alat ilmiah. Kelima, mahasiswa mulai membangun kebiasaan reproduisibilitas dengan menyimpan kode, data, dan grafik.

Implikasi lainnya adalah penguatan hubungan antara kimia fisik, kimia organik, dan spektroskopi. Model partikel dalam kotak tidak hanya berada dalam wilayah fisika kuantum, tetapi juga dapat dikaitkan dengan sistem elektron π dan serapan cahaya. Ini membantu mahasiswa melihat bahwa kimia kuantum bukan bagian terpisah dari kimia, melainkan fondasi konseptual yang menembus berbagai cabang kimia.

12. Transisi ke Dasar Teori

Setelah tujuan praktikum dipahami, langkah berikutnya adalah membahas dasar teori. Dasar teori akan menjelaskan secara lebih rinci bagaimana model partikel dalam kotak dirumuskan, bagaimana persamaan Schrödinger diselesaikan untuk sistem satu dimensi, mengapa fungsi gelombang harus memenuhi syarat batas, bagaimana energi E_n diperoleh, mengapa rapat probabilitas dinyatakan sebagai ψ^2 , serta bagaimana model ini dapat digunakan sebagai pendekatan awal untuk memahami elektron π dalam molekul terkonjugasi.

Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap membaca teori. Mereka tidak hanya melihat persamaan sebagai simbol, tetapi mengetahui apa yang harus dicari: kuantisasi energi, bentuk fungsi gelombang, rapat probabilitas, simpul, hubungan panjang kotak dengan energi, dan relevansinya bagi kimia.

4.2 Dasar Teori

Dasar teori praktikum ini bertumpu pada model **partikel dalam kotak satu dimensi**, yaitu model mekanika kuantum yang menggambarkan sebuah partikel bermassa m yang dibatasi bergerak hanya di dalam suatu ruang sepanjang L . Di luar ruang tersebut, partikel dianggap tidak dapat berada karena energi potensial dinding kotak diasumsikan tak hingga. Model ini tampak sederhana, tetapi memiliki nilai konseptual yang sangat besar karena memperlihatkan secara jelas bagaimana **syarat batas** pada fungsi gelombang menghasilkan **kuantisasi energi**, bagaimana **fungsi gelombang** berhubungan dengan **rapat probabilitas**, dan bagaimana **ukuran ruang** yang tersedia bagi partikel memengaruhi tingkat energinya.

Dalam model ini, partikel hanya boleh berada pada daerah:

$$0 < x < L$$

Di dalam kotak, energi potensial dianggap nol:

$$V(x) = 0$$

Sementara itu, pada $x \leq 0$ dan $x \geq L$, energi potensial dianggap tak hingga:

$$V(x) = \infty$$

Makna fisiknya adalah partikel benar-benar terkurung. Ia tidak dapat menembus dinding. Oleh karena itu, probabilitas menemukan partikel di luar kotak harus nol. Konsekuensinya, fungsi gelombang juga harus bernilai nol di luar kotak dan pada batas kotak. Inilah yang disebut **syarat batas**:

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 0 \\ \psi(L) &= 0\end{aligned}$$

Syarat batas inilah yang menjadi kunci lahirnya kuantisasi energi. Jika partikel diperlakukan secara klasik, ia dapat bergerak dalam kotak dengan energi sembarang. Namun, dalam mekanika

kuantum, partikel dijelaskan oleh fungsi gelombang. Fungsi gelombang yang boleh ada di dalam kotak bukan sembarang fungsi, melainkan fungsi yang memenuhi persamaan Schrödinger dan syarat batas. Hanya bentuk gelombang tertentu yang cocok dengan kedua dinding kotak. Akibatnya, hanya energi tertentu yang diperbolehkan.

1. Persamaan Schrödinger untuk Partikel dalam Kotak

Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu untuk satu dimensi dapat ditulis secara konseptual sebagai:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Untuk partikel dalam kotak satu dimensi dengan $V(x) = 0$ di dalam kotak, bentuk persamaan menjadi:

$$-(\hbar^2 / 2m) d^2\psi/dx^2 = E\psi$$

Persamaan ini menunjukkan bahwa energi E berkaitan dengan kelengkungan fungsi gelombang ψ . Jika fungsi gelombang berosilasi lebih cepat, turunannya terhadap x menjadi lebih besar, dan energi yang terkait juga lebih tinggi. Dengan demikian, energi dalam model ini bukan hanya angka abstrak, tetapi terkait langsung dengan bentuk fungsi gelombang.

Penyelesaian persamaan tersebut menghasilkan fungsi sinus dan kosinus. Namun, karena fungsi gelombang harus nol pada $x = 0$ dan $x = L$, hanya bentuk sinus tertentu yang memenuhi syarat. Hasil akhirnya adalah fungsi gelombang keadaan stasioner:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

dengan:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Bilangan n disebut **bilangan kuantum**. Setiap nilai n menghasilkan fungsi gelombang yang berbeda dan keadaan energi yang berbeda. Dalam rujukan kimia kuantum, fungsi gelombang partikel dalam kotak dinyatakan dalam bentuk $\sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$, dan setiap nilai n memberikan fungsi gelombang serta keadaan yang berbeda.

Energi yang bersesuaian dengan fungsi gelombang tersebut adalah:

$$E_n = n^2 \hbar^2 / 8mL^2$$

atau dapat juga ditulis dalam bentuk $\hbar$:

$$E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$$

Kedua bentuk tersebut setara karena:

$$\hbar = h / 2\pi$$

Persamaan energi ini memperlihatkan tiga hal penting. Pertama, energi bergantung pada kuadrat bilangan kuantum n . Kedua, energi berbanding terbalik dengan massa partikel. Ketiga, energi berbanding terbalik dengan kuadrat panjang kotak. Artinya, semakin kecil kotak, semakin besar energi partikel; semakin besar kotak, semakin kecil energi partikel.

2. Mengapa Energi Terkuantisasi?

Energi terkuantisasi karena fungsi gelombang harus membentuk gelombang berdiri yang cocok di dalam kotak. Analogi sederhananya dapat dilihat pada dawai gitar. Dawai yang kedua ujungnya terikat hanya dapat bergetar dalam pola tertentu. Tidak semua panjang gelombang diperbolehkan. Hanya gelombang yang memiliki simpul pada kedua ujung dawai yang dapat bertahan. Demikian pula partikel dalam kotak: fungsi gelombangnya harus bernilai nol pada kedua batas, sehingga hanya pola sinus tertentu yang diperbolehkan.

Untuk $n = 1$, di dalam kotak terdapat setengah gelombang. Untuk $n = 2$, terdapat satu gelombang penuh. Untuk $n = 3$, terdapat satu setengah gelombang. Secara umum, semakin besar n , semakin banyak osilasi fungsi gelombang di dalam kotak. Karena osilasi yang lebih cepat berkaitan dengan energi lebih tinggi, maka energi meningkat ketika n meningkat.

Kuantisasi energi ini tidak muncul karena energi “dipaksa” bernilai diskrit, melainkan karena fungsi gelombang harus memenuhi syarat matematis. Inilah salah satu pelajaran paling penting dalam mekanika kuantum: batas ruang menghasilkan batas bentuk fungsi, dan batas bentuk fungsi menghasilkan tingkat energi tertentu.

Dalam bahasa praktikum, mahasiswa perlu memahami bahwa n bukan sekadar nomor urut. Bilangan kuantum n menentukan:

1. Bentuk fungsi gelombang.
2. Jumlah simpul.
3. Energi keadaan.
4. Pola rapat probabilitas.
5. Jarak relatif antara tingkat energi.

Oleh karena itu, ketika kode Python menghitung E_n untuk $n = 1$ sampai 5, mahasiswa sedang menghitung keadaan kuantum yang berbeda, bukan hanya mengganti angka dalam rumus.

3. Mengapa $n = 0$ Tidak Diperbolehkan?

Dalam persamaan energi, mungkin tampak menggoda untuk memasukkan $n = 0$. Jika $n = 0$, maka:

$$E_0 = 0$$

Akan tetapi, $n = 0$ tidak diperbolehkan. Alasannya bukan sekadar karena rumus menyatakan n dimulai dari 1, tetapi karena fungsi gelombangnya menjadi:

$$\psi_0(x) = \sqrt{2/L} \sin(0) = 0$$

Artinya, fungsi gelombang bernilai nol di seluruh kotak. Jika $\psi = 0$ di seluruh ruang, maka ψ^2 juga nol di seluruh ruang. Ini berarti probabilitas menemukan partikel di mana pun adalah nol. Keadaan semacam itu tidak merepresentasikan partikel yang benar-benar ada. Karena itu, keadaan terendah adalah $n = 1$, bukan $n = 0$.

Konsekuensinya sangat penting: partikel yang terkurung dalam kotak tidak dapat memiliki energi nol. Ia selalu memiliki energi minimum yang disebut **energi keadaan dasar**. Dalam bentuk umum:

$$E_1 = h^2 / 8mL^2$$

Energi ini sering dikaitkan secara konseptual dengan gagasan **energi titik nol**. Walaupun model partikel dalam kotak berbeda dari osilator harmonik, keduanya mengajarkan prinsip yang sama: sistem kuantum terikat tidak dapat selalu diam dengan energi nol seperti bayangan klasik.

Secara filosofis-ilmiah, $n = 0$ yang tidak diperbolehkan menunjukkan bahwa mekanika kuantum menolak gambaran klasik tentang partikel yang bisa “diam total” di dalam ruang terbatas. Jika partikel benar-benar diam dan posisinya dibatasi, maka gambaran itu bertentangan dengan struktur gelombang kuantum. Dengan demikian, praktikum ini memperkenalkan pergeseran mendasar dari mekanika klasik ke mekanika kuantum.

4. Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$

Fungsi gelombang adalah fungsi matematis yang menggambarkan keadaan kuantum suatu sistem. Dalam model partikel dalam kotak, fungsi gelombang stasioner berbentuk:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

Faktor $\sqrt{2/L}$ disebut faktor normalisasi. Fungsi gelombang harus dinormalisasi karena total probabilitas menemukan partikel di seluruh kotak harus sama dengan 1:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

Normalisasi berarti bahwa partikel pasti berada di suatu tempat di dalam kotak. Ia tidak mungkin hilang dari ruang yang diperbolehkan. Dalam konteks praktikum, mahasiswa dapat menggunakan Python untuk memverifikasi secara numerik bahwa integral ψ^2 dari $x = 0$ sampai L mendekati 1.

Fungsi ψ dapat bernilai positif, negatif, atau nol. Nilai positif dan negatif pada ψ tidak boleh ditafsirkan sebagai probabilitas positif dan negatif. Probabilitas diperoleh dari ψ^2 atau $|\psi|^2$. Tanda positif dan negatif pada ψ berkaitan dengan fase fungsi gelombang. Dalam kimia molekuler, perbedaan fase ini sangat penting ketika membahas interferensi orbital, pembentukan orbital bonding dan antibonding, serta simpul pada orbital molekul.

Fungsi gelombang partikel dalam kotak juga memperlihatkan sifat ortonormalitas. Fungsi gelombang untuk keadaan berbeda saling ortogonal, dan integral hasil kali fungsi gelombang

keadaan berbeda bernilai nol. Rujukan kimia kuantum menjelaskan bahwa fungsi ψ_i dan ψ_j untuk $i \neq j$ dikatakan saling ortogonal, sedangkan gabungan normalisasi dan ortogonalitas disebut ortonormalitas.

Makna ortogonalitas dalam praktikum dasar tidak perlu dibahas terlalu teknis, tetapi perlu diperkenalkan. Secara sederhana, keadaan $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, dan seterusnya adalah keadaan yang berbeda dan independen secara matematis. Ini menjadi dasar penting bagi pembahasan lebih lanjut tentang basis fungsi, orbital, kombinasi linear orbital atom, dan metode variasi pada kimia kuantum.

5. Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$

Rapat probabilitas adalah kuadrat fungsi gelombang:

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$$

Untuk fungsi gelombang real pada model ini:

$$\rho_n(x) = \psi_n^2(x)$$

Rapat probabilitas menunjukkan peluang relatif menemukan partikel di sekitar posisi x . Jika ψ^2 besar pada suatu daerah, partikel lebih mungkin ditemukan di daerah tersebut. Jika $\psi^2 = 0$, partikel tidak mungkin ditemukan di titik tersebut.

Untuk $n = 1$, fungsi gelombang memiliki nilai maksimum di tengah kotak. Akibatnya, rapat probabilitas juga maksimum di sekitar tengah kotak. Untuk $n = 2$, fungsi gelombang memiliki simpul di tengah kotak, sehingga rapat probabilitas di tengah kotak bernilai nol. Hal ini dapat terasa aneh jika dipahami dengan intuisi klasik. Bagaimana partikel dapat berada di kiri dan kanan kotak, tetapi tidak pernah ditemukan di tengah pada keadaan $n = 2$? Rujukan kimia kuantum menegaskan bahwa paradoks tampak seperti ini muncul karena kita mencoba memahami partikel mikroskopik dengan pengalaman gerak benda makroskopik; elektron dan partikel mikroskopik tidak dapat dideskripsikan sepenuhnya dengan konsep fisika klasik.

Pemahaman rapat probabilitas sangat penting untuk kimia. Ketika mahasiswa mempelajari orbital atom, mereka akan melihat bentuk orbital s, p, d, dan f. Bentuk-bentuk itu bukan lintasan elektron, melainkan representasi fungsi gelombang atau rapat probabilitas. Jika mahasiswa sudah memahami ψ dan ψ^2 pada partikel dalam kotak, mereka akan lebih siap memahami orbital sebagai distribusi probabilitas elektron, bukan lintasan planet mengelilingi matahari.

Dalam praktikum, mahasiswa harus membandingkan grafik ψ dan ψ^2 . Perbandingan ini menghasilkan beberapa pengamatan penting:

1. ψ dapat bernilai negatif, tetapi ψ^2 selalu tidak negatif.
2. Titik simpul pada ψ tetap menjadi titik nol pada ψ^2 .
3. Puncak ψ tidak selalu harus ditafsirkan langsung sebagai probabilitas sebelum dikuadratkan.

4. Bentuk ψ^2 memperlihatkan daerah kemungkinan menemukan partikel.
5. Semakin tinggi n , semakin banyak daerah probabilitas yang dipisahkan oleh simpul.

6. Simpul dalam Fungsi Gelombang

Simpul adalah titik di dalam kotak tempat fungsi gelombang bernilai nol. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi, simpul internal muncul pada posisi tertentu di antara $x = 0$ dan $x = L$. Batas kotak sendiri juga merupakan titik nol fungsi gelombang, tetapi yang biasanya dibahas sebagai simpul internal adalah titik nol di dalam kotak.

Jumlah simpul internal untuk keadaan n adalah:

$$\text{jumlah simpul internal} = n - 1$$

Maka:

n	Jumlah Simpul Internal	Keterangan
1	0	Keadaan dasar
2	1	Satu titik nol di dalam kotak
3	2	Dua titik nol di dalam kotak
4	3	Tiga titik nol di dalam kotak
5	4	Empat titik nol di dalam kotak

Rujukan kimia kuantum menjelaskan bahwa setiap kenaikan satu pada bilangan kuantum n membuat ψ memiliki satu simpul tambahan.

Simpul bukan hanya tanda visual pada grafik. Simpul memiliki makna fisik dan kimia. Pada simpul, probabilitas menemukan partikel adalah nol. Dalam orbital molekul, simpul sering berkaitan dengan sifat antibonding. Orbital antibonding memiliki simpul antara inti atom, sehingga kerapatan elektron di daerah ikatan menurun. Oleh karena itu, pemahaman simpul pada partikel dalam kotak menjadi landasan untuk memahami konsep orbital bonding, antibonding, HOMO, LUMO, dan reaktivitas molekul.

Secara energi, semakin banyak simpul, semakin tinggi energi. Hal ini masuk akal karena fungsi dengan lebih banyak simpul berubah lebih cepat terhadap posisi. Perubahan yang lebih cepat berarti kelengkungan fungsi lebih besar. Dalam persamaan Schrödinger, kelengkungan fungsi gelombang berkaitan dengan energi kinetik. Dengan demikian, grafik fungsi gelombang mengandung informasi energi.

7. Hubungan Panjang Kotak dengan Energi

Persamaan energi partikel dalam kotak:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

menunjukkan bahwa energi berbanding terbalik dengan L^2 . Hubungan ini sangat penting:

$$E_n \propto 1/L^2$$

Jika panjang kotak diperkecil menjadi setengah, energi meningkat menjadi empat kali lebih besar. Jika panjang kotak diperbesar dua kali, energi turun menjadi seperempat. Hal ini menunjukkan bahwa pembatasan ruang meningkatkan energi.

Dalam bahasa mekanika kuantum, semakin sempit ruang yang tersedia, semakin kuat partikel dibatasi. Pembatasan posisi ini berkaitan dengan meningkatnya ketidakpastian momentum, sehingga energi kinetik meningkat. Walaupun praktikum ini tidak secara formal menghitung relasi ketidakpastian, model partikel dalam kotak memberikan ilustrasi yang sangat baik tentang hubungan antara lokalisasi dan energi.

Dalam konteks kimia, hubungan L dan energi dapat dikaitkan dengan elektron π dalam molekul terkonjugasi. Jika elektron π terdelokalisasi sepanjang rantai yang lebih panjang, maka analog panjang kotaknya lebih besar. Karena energi berbanding terbalik dengan L^2 , jarak antar tingkat energi menjadi lebih kecil. Dengan demikian, transisi elektronik dapat terjadi pada energi lebih rendah. Rujukan kimia kuantum yang digunakan dalam buku ini juga menekankan bahwa model partikel dalam kotak berguna untuk memahami delokalisasi elektron π secara kualitatif, misalnya pada poliena terkonjugasi, dan perluasan panjang konjugasi menurunkan jarak tingkat energi serta menggeser absorpsi ke panjang gelombang lebih besar.

Hubungan ini perlu dipahami secara kritis. Molekul terkonjugasi bukan kotak satu dimensi ideal. Elektron mengalami tarikan inti, tolakan elektron-elektron, variasi panjang ikatan, geometri molekul, dan efek lingkungan. Namun, model partikel dalam kotak memberikan intuisi awal yang berguna: semakin panjang daerah delokalisasi, semakin rapat tingkat energi. Intuisi ini akan membantu mahasiswa memahami hasil perhitungan HOMO-LUMO pada bab DFT dan reaktivitas molekul.

8. Transisi Energi dan Serapan Cahaya

Jika partikel berpindah dari tingkat energi awal i ke tingkat energi akhir f , selisih energinya adalah:

$$\Delta E = E_f - E_i$$

Dalam interaksi radiasi dan materi, selisih energi ini dapat berkaitan dengan energi foton:

$$\Delta E = h\nu$$

dengan ν adalah frekuensi cahaya. Karena:

$$c = \lambda\nu$$

maka energi foton juga dapat ditulis:

$$\Delta E = hc/\lambda$$

Hubungan ini memberi dasar konseptual untuk menghubungkan tingkat energi kuantum dengan spektroskopi. Jika ΔE besar, panjang gelombang λ kecil. Jika ΔE kecil, panjang gelombang λ besar. Dalam sistem terkonjugasi panjang, ΔE antara tingkat tertentu menjadi lebih kecil, sehingga serapan dapat bergeser ke panjang gelombang yang lebih panjang.

Model ini sering digunakan secara kualitatif untuk menjelaskan mengapa molekul dengan konjugasi lebih panjang dapat menyerap cahaya pada daerah yang lebih merah. Dalam kimia warna, prinsip ini sangat penting. Banyak zat warna organik memiliki sistem π terkonjugasi panjang. Semakin panjang sistem konjugasi, semakin kecil selisih energi antara orbital terisi tertinggi dan orbital kosong terendah secara kualitatif. Meskipun model partikel dalam kotak tidak identik dengan HOMO-LUMO DFT, keduanya sama-sama membantu memahami kaitan antara delokalisasi dan energi transisi.

Dalam praktikum ini, mahasiswa belum diminta menghitung spektrum UV-Vis molekul nyata secara akurat. Tujuan utamanya adalah membangun intuisi: panjang kotak memengaruhi energi; energi memengaruhi transisi; transisi berkaitan dengan cahaya. Intuisi ini akan menjadi bekal ketika membahas orbital molekul, HOMO-LUMO, dan spektroskopi komputasi.

9. Kaitan dengan Elektron π dalam Molekul Terkonjugasi

Elektron π dalam molekul terkonjugasi berasal dari tumpang tindih orbital p yang sejajar. Pada etilena, sistem π terbatas pada dua atom karbon. Pada butadiena, sistem π tersebar pada empat atom karbon. Pada heksatriena, sistem π tersebar pada enam atom karbon. Semakin panjang rantai konjugasi, semakin luas daerah delokalisasi elektron π .

Model partikel dalam kotak dapat digunakan sebagai pendekatan kasar dengan menganggap elektron π bergerak dalam kotak sepanjang sistem konjugasi. Panjang kotak L kemudian dikaitkan dengan panjang rantai konjugasi. Energi tingkat kuantum dihitung dengan persamaan partikel dalam kotak. Untuk sistem dengan jumlah elektron π tertentu, elektron-elektron mengisi tingkat energi dari bawah ke atas sesuai prinsip Pauli, dua elektron per tingkat dengan spin berlawanan. Transisi elektronik sederhana dapat dipandang sebagai promosi elektron dari tingkat terisi tertinggi ke tingkat kosong terendah.

Contoh konseptual:

- Etilena memiliki 2 elektron π .
- Butadiena memiliki 4 elektron π .
- Heksatriena memiliki 6 elektron π .

Dalam model sederhana, semakin panjang L , semakin kecil jarak antar tingkat energi. Maka, energi transisi menurun ketika sistem konjugasi makin panjang. Ini menjelaskan secara kualitatif hubungan antara panjang konjugasi dan warna.

Namun, mahasiswa harus memahami batas model ini. Elektron π dalam molekul nyata tidak bergerak dalam potensial nol dengan dinding tak hingga. Potensial molekul dipengaruhi oleh inti atom dan elektron lain. Selain itu, molekul nyata memiliki struktur tiga dimensi, variasi panjang

ikatan, dan interaksi elektron-elektron. Karena itu, model partikel dalam kotak hanya digunakan sebagai **model konseptual**, bukan sebagai perhitungan kuantitatif presisi tinggi untuk spektrum molekul nyata.

10. Batas dan Kekuatan Model Partikel dalam Kotak

Model partikel dalam kotak memiliki kekuatan besar karena sederhana, analitik, dan mudah divisualisasikan. Mahasiswa dapat menghitung energi dengan rumus langsung. Fungsi gelombang dapat diplot. Rapat probabilitas dapat diamati. Simpul dapat dihitung. Hubungan panjang kotak dan energi dapat disimulasikan. Semua ini membuat model sangat cocok sebagai praktikum pertama.

Namun, model ini juga memiliki batas:

1. Sistem dianggap satu dimensi.
2. Dinding kotak dianggap tak hingga.
3. Potensial di dalam kotak dianggap nol.
4. Tidak ada interaksi partikel dengan partikel lain.
5. Tidak ada struktur inti atom.
6. Tidak ada korelasi elektron.
7. Tidak ada efek pelarut atau lingkungan.
8. Tidak ada geometri molekul nyata.

Karena itu, hasil model tidak boleh ditafsirkan secara berlebihan. Jika model digunakan untuk elektron π , hasilnya bersifat kualitatif. Model ini dapat menjelaskan arah kecenderungan, tetapi bukan pengganti perhitungan struktur elektronik yang lebih lengkap.

Kekuatan model justru terletak pada kesederhanaannya. Model yang terlalu realistis sering sulit dipahami pemula. Model partikel dalam kotak mengisolasi prinsip dasar: batas ruang, fungsi gelombang, kuantisasi, probabilitas, dan energi. Setelah prinsip ini dipahami, mahasiswa lebih siap menghadapi model yang lebih kompleks.

11. Implikasi untuk Praktikum Python

Dasar teori ini langsung diterjemahkan ke dalam kode Python. Setiap konsep memiliki padanan komputasional:

Konsep Teori	Padanan dalam Python
Panjang kotak L	Variabel <code>L</code>
Bilangan kuantum n	Array <code>n_values</code>
Energi E_n	Fungsi <code>energi_partikel_kotak()</code>
Fungsi gelombang $\psi_n(x)$	Fungsi <code>psi_n()</code>
Rapat probabilitas ψ^2	Variabel <code>probabilitas = psi2</code>
Simpul	Titik saat $\psi = 0$
Grafik ψ	Plot Matplotlib
Grafik ψ^2	Plot Matplotlib

Tabel energi	DataFrame pandas
Pengaruh L	Simulasi variasi L_values

Dengan demikian, praktikum ini tidak memisahkan teori dan kode. Rumus energi menjadi fungsi Python. Fungsi gelombang menjadi array nilai. Rapat probabilitas menjadi kuadrat array. Grafik menjadi visualisasi konsep. Tabel energi menjadi data numerik untuk laporan. Inilah inti praktikum komputasi: teori tidak hanya dijelaskan, tetapi dijalankan.

Mahasiswa harus memahami bahwa kode Python bukan sekadar alat bantu menggambar. Kode adalah cara untuk menguji hubungan matematis. Misalnya, ketika L diperkecil dan energi meningkat, mahasiswa melihat langsung akibat persamaan $E_n \propto 1/L^2$. Ketika n naik dan simpul bertambah, mahasiswa melihat langsung akibat bentuk $\sin(n\pi x/L)$. Ketika ψ dikuadratkan, mahasiswa melihat perubahan dari fungsi gelombang menjadi rapat probabilitas. Semua ini memperkuat pemahaman konseptual.

12. Contoh Interpretasi Konseptual

Misalkan panjang kotak L dibuat tetap. Untuk $n = 1$, energi paling rendah dan fungsi gelombang tidak memiliki simpul internal. Rapat probabilitas maksimum di tengah kotak. Keadaan ini disebut keadaan dasar. Untuk $n = 2$, energi empat kali lebih besar daripada $n = 1$. Fungsi gelombang memiliki satu simpul internal di tengah kotak. Rapat probabilitas di tengah kotak nol. Untuk $n = 3$, energi sembilan kali lebih besar daripada $n = 1$ dan terdapat dua simpul internal.

Dari contoh ini, mahasiswa dapat menyimpulkan:

1. Energi meningkat seiring kenaikan n.
2. Jumlah simpul meningkat seiring kenaikan n.
3. Rapat probabilitas berubah bentuk sesuai keadaan kuantum.
4. Partikel dalam keadaan tereksitasi memiliki pola probabilitas yang berbeda dari keadaan dasar.
5. Konsep “partikel bergerak bolak-balik” secara klasik tidak memadai untuk menjelaskan distribusi probabilitas kuantum.

Jika panjang kotak diperbesar, semua tingkat energi menurun. Namun, pola n^2 tetap berlaku. Jika panjang kotak diperkecil, energi meningkat. Dari sini mahasiswa dapat memahami bahwa ruang yang lebih sempit memaksa fungsi gelombang memiliki kelengkungan lebih besar, sehingga energi lebih tinggi.

13. Sintesis Teori

Model partikel dalam kotak satu dimensi memberikan fondasi teori yang kuat untuk praktikum pertama. Dari model ini, mahasiswa mempelajari bahwa fungsi gelombang harus memenuhi persamaan Schrödinger dan syarat batas. Syarat batas menghasilkan hanya nilai n tertentu. Nilai n menentukan fungsi gelombang dan energi. Fungsi gelombang yang dikuadratkan menghasilkan rapat probabilitas. Simpul menunjukkan titik dengan probabilitas nol. Panjang kotak menentukan

besar kecilnya energi. Model ini kemudian dapat digunakan secara kualitatif untuk memahami elektron π dalam molekul terkonjugasi.

Dengan dasar teori ini, mahasiswa siap masuk ke subbab berikutnya, yaitu software yang digunakan. Pada subbab tersebut akan dijelaskan bagaimana Python, Jupyter Notebook, Google Colab, ChemCompute Jupyter jika tersedia, dan spreadsheet dapat digunakan untuk menjalankan perhitungan serta visualisasi model partikel dalam kotak.

4.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 1 harus dipilih berdasarkan tujuan pedagogis dan teknis praktikum. Karena praktikum ini berfokus pada **visualisasi fungsi gelombang, rapat probabilitas, kuantisasi energi, simpul, dan pengaruh panjang kotak terhadap energi**, maka software yang dipakai tidak harus berupa paket kimia kuantum berat seperti ORCA, GAMESS, Gaussian, atau Psi4. Praktikum ini dapat dijalankan dengan perangkat yang lebih ringan, terutama Python dan lingkungan notebook, karena model partikel dalam kotak memiliki rumus analitik yang dapat langsung dihitung dan divisualisasikan secara numerik.

Software utama yang digunakan dalam praktikum ini adalah:

1. **Python / Jupyter Notebook.**
2. **Google Colab.**
3. **ChemCompute Jupyter Notebook jika tersedia.**
4. **Spreadsheet sebagai pembanding.**

Keempat software tersebut tidak memiliki kedudukan yang sama. Python dan Jupyter Notebook menjadi jalur utama karena keduanya memungkinkan mahasiswa menulis kode, menghitung energi, membuat grafik fungsi gelombang, menyimpan tabel CSV, dan menghasilkan output yang reproduibel. Google Colab menjadi jalur alternatif berbasis cloud untuk mahasiswa yang belum dapat menginstal Python di komputer lokal. ChemCompute Jupyter Notebook digunakan jika tersedia, terutama untuk menjaga kesinambungan dengan ekosistem ChemCompute yang sudah dibahas pada Bab 2. Spreadsheet digunakan sebagai pembanding, bukan sebagai alat utama, karena spreadsheet mudah dipahami untuk tabel energi sederhana tetapi kurang kuat untuk struktur kode reproduibel yang kompleks.

Secara konseptual, pemilihan software pada praktikum ini mengikuti prinsip: **alat harus sesuai dengan model**. Karena model partikel dalam kotak bersifat sederhana dan matematis, software yang paling tepat adalah software yang dapat mengeksekusi rumus, membuat array numerik, dan menghasilkan grafik. Python sangat sesuai untuk tujuan tersebut. Jupyter Notebook sangat sesuai karena mahasiswa dapat menulis teori singkat, kode, tabel, grafik, dan interpretasi dalam satu dokumen. Google Colab sesuai untuk menghilangkan hambatan instalasi. Spreadsheet sesuai untuk memeriksa hasil numerik dasar. ChemCompute Jupyter sesuai jika dosen ingin menyatukan praktikum ini dengan platform laboratorium komputasi berbasis web.

1. Python sebagai Bahasa Utama Praktikum

Python adalah bahasa utama dalam praktikum ini karena mampu menggabungkan kemudahan sintaks, kekuatan komputasi numerik, dan dukungan ekosistem ilmiah. Situs resmi Python menyediakan installer, dokumentasi pustaka standar, tutorial, dan panduan penggunaan Python untuk berbagai sistem operasi, sehingga Python dapat dipakai sebagai fondasi praktikum komputasi ilmiah lintas perangkat. ([Python.org](https://python.org))

Dalam Praktikum 1, Python digunakan untuk beberapa tugas pokok:

1. Mendefinisikan konstanta fisika, seperti h , massa elektron, dan faktor konversi joule ke elektronvolt.
2. Menghitung energi partikel dalam kotak untuk $n = 1$ sampai 5.
3. Membuat fungsi gelombang $\psi_n(x)$.
4. Menghitung rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$.
5. Membuat tabel energi dalam joule dan elektronvolt.
6. Membuat grafik ψ , ψ^2 , dan energi terhadap n .
7. Mensimulasikan pengaruh perubahan panjang kotak L terhadap energi.
8. Mengekspor tabel hasil ke CSV dan grafik ke file gambar.

Python dipilih karena semua langkah tersebut dapat ditulis secara eksplisit. Mahasiswa tidak hanya memperoleh angka, tetapi juga melihat bagaimana angka diperoleh. Misalnya, rumus energi:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

dapat diterjemahkan menjadi fungsi Python. Fungsi gelombang:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

dapat diterjemahkan menjadi array numerik dan grafik. Dengan demikian, Python membuat hubungan antara teori dan visualisasi menjadi langsung.

Keunggulan utama Python dalam praktikum ini adalah **transparansi**. Jika mahasiswa menghitung energi dengan Python, rumus yang digunakan dapat dilihat. Jika mahasiswa membuat grafik, data yang diplot dapat diperiksa. Jika mahasiswa mengekspor tabel, file CSV dapat dibuka kembali. Transparansi ini sangat penting karena praktikum kimia kuantum tidak boleh menjadi aktivitas menekan tombol tanpa memahami proses.

Namun, Python juga memiliki batas. Python hanya akan menghasilkan hasil yang benar jika rumus, satuan, dan kode ditulis benar. Jika mahasiswa salah memasukkan panjang kotak, salah mendefinisikan massa, atau salah mengonversi satuan, Python tetap akan menjalankan kode dan menghasilkan angka. Oleh karena itu, penggunaan Python harus selalu disertai validasi. Mahasiswa harus memeriksa satuan, membandingkan hasil dengan perhitungan manual sederhana, dan memastikan grafik sesuai dengan teori.

2. Jupyter Notebook sebagai Buku Kerja Komputasional

Jupyter Notebook digunakan sebagai lingkungan kerja interaktif untuk menulis dan menjalankan kode Python. Project Jupyter menjelaskan bahwa Jupyter Notebook merupakan platform komputasi interaktif berbasis web yang menggabungkan kode langsung, persamaan, teks naratif, visualisasi, dan komponen interaktif dalam satu dokumen. ([Jupyter](#)) Karakter ini menjadikan Jupyter sangat sesuai untuk praktikum kimia kuantum karena mahasiswa dapat menggabungkan teori, kode, hasil, grafik, dan interpretasi dalam satu alur.

Dalam Praktikum 1, Jupyter Notebook dapat digunakan sebagai **buku kerja praktikum digital**. Mahasiswa dapat menulis:

```
Judul praktikum
Tujuan praktikum
Dasar teori singkat
Kode Python
Tabel energi
Grafik fungsi gelombang
Grafik rapat probabilitas
Analisis hasil
Kesimpulan
```

Keunggulan Jupyter adalah kemampuannya menampilkan hasil secara langsung. Setelah mahasiswa menjalankan sel kode, grafik dapat muncul di bawah kode. Ini sangat membantu ketika mahasiswa mempelajari fungsi gelombang. Mereka dapat mengubah nilai n , mengubah panjang kotak L , lalu melihat perubahan grafik. Interaktivitas semacam ini sangat kuat secara pedagogis karena mahasiswa belajar melalui eksplorasi.

Contoh penggunaan Jupyter dalam praktikum ini:

Cell Markdown:

```
"Fungsi gelombang partikel dalam kotak diberikan oleh  $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$ ."
```

Cell Code:

```
Menghitung  $\psi_n(x)$  untuk  $n = 1$  sampai 5.
```

Cell Output:

```
Grafik fungsi gelombang untuk setiap  $n$ .
```

Cell Markdown:

```
"Jumlah simpul internal bertambah ketika  $n$  meningkat."
```

Struktur seperti ini membuat notebook bukan hanya file kode, tetapi narasi ilmiah. Mahasiswa dapat melihat bahwa teori, kode, grafik, dan interpretasi saling berkaitan.

Namun, Jupyter juga memiliki risiko. Notebook dapat dijalankan tidak berurutan. Mahasiswa dapat menjalankan sel ke-5 sebelum sel ke-2, atau menghapus sel penting tetapi variabelnya masih tersimpan dalam kernel. Penelitian tentang notebook Jupyter menunjukkan bahwa notebook sering terdiri dari potongan kode yang dapat dijalankan dalam urutan berbeda, dan hal itu dapat

menimbulkan hasil berbeda akibat efek samping antar sel. ([arXiv](#)) Karena itu, sebelum notebook dikumpulkan, mahasiswa harus menjalankan ulang semua sel dari awal sampai akhir. Jika notebook tidak dapat dijalankan ulang secara berurutan, maka notebook belum memenuhi standar praktikum.

Dalam buku ini, Jupyter Notebook direkomendasikan untuk tahap pembelajaran dan eksplorasi. Untuk arsip akhir, mahasiswa tetap perlu menyimpan script `.py`, file CSV, gambar, dan laporan sesuai standar folder Bab 2. Notebook sangat baik untuk belajar, tetapi output final harus tetap terdokumentasi.

3. Google Colab sebagai Alternatif Tanpa Instalasi Lokal

Google Colab digunakan sebagai jalur alternatif jika mahasiswa tidak dapat menginstal Python atau Jupyter di komputer lokal. Google menyatakan bahwa Colab adalah layanan Jupyter Notebook ter-hosting yang tidak memerlukan setup dan menyediakan akses ke sumber daya komputasi, termasuk GPU dan TPU, meskipun Praktikum 1 tidak memerlukan GPU. ([research.google.com](#)) Google for Developers juga menjelaskan Colab sebagai lingkungan notebook ter-hosting dengan runtime yang sudah dikonfigurasi sehingga pengguna dapat mulai menjalankan kode dengan cepat. ([Google for Developers](#))

Dalam Praktikum 1, Colab dapat digunakan untuk:

1. Menjalankan kode energi partikel dalam kotak.
2. Membuat grafik fungsi gelombang.
3. Membuat grafik rapat probabilitas.
4. Mengekspor tabel energi.
5. Menyimpan notebook ke Google Drive.
6. Membagikan notebook kepada dosen atau teman kelompok.

Keunggulan utama Colab adalah **aksesibilitas**. Mahasiswa cukup menggunakan browser dan akun Google. Tidak perlu mengatur PATH Python, menginstal Jupyter, atau membuat environment lokal. Ini sangat membantu kelas besar, pembelajaran daring, atau mahasiswa dengan perangkat terbatas. Dosen dapat membagikan template notebook, lalu mahasiswa menggandakan dan menjalankannya.

Namun, Colab juga memiliki keterbatasan. Pertama, Colab membutuhkan koneksi internet. Kedua, runtime dapat terputus. Ketiga, file yang diunggah ke runtime sementara dapat hilang jika sesi berakhir. Keempat, beberapa paket perlu dipasang ulang setiap sesi jika tidak tersedia. Kelima, struktur folder lokal berbeda dengan struktur folder komputer biasa. Oleh karena itu, mahasiswa harus menyimpan notebook dan file hasil secara sadar.

Untuk Praktikum 1, Colab sangat cocok sebagai jalur cepat. Namun, mahasiswa tetap perlu memahami bahwa Colab bukan tempat penyimpanan permanen kecuali file disimpan ke Google Drive atau diunduh. File CSV dan gambar hasil praktikum harus tetap dikumpulkan sesuai standar:

```
data/energi_partikel_dalam_kotak.csv
gambar/fungsi_gelombang.png
```

gambar/rapat_probabilitas.png
gambar/energi_terhadap_n.png

Secara pedagogis, Colab membantu demokratisasi akses. Mahasiswa yang komputernya tidak kuat tetap dapat belajar Python. Namun, dari sisi reproduisibilitas, mahasiswa tetap harus mencatat lingkungan kerja, file data, dan hasil ekspor. Akses mudah tidak boleh menghilangkan kedisiplinan ilmiah.

4. ChemCompute Jupyter Notebook jika Tersedia

ChemCompute Jupyter Notebook digunakan jika tersedia pada kelas atau institusi. ChemCompute sendiri menyediakan paket untuk pengajaran kimia komputasi; halaman paket ChemCompute menyebut bahwa GAMESS dan Jupyter Notebooks memiliki eksperimen siap pakai untuk digunakan dalam kelas. ([ChemCompute](#)) Dalam konteks Praktikum 1, ChemCompute Jupyter dapat menjadi jalur yang menarik karena menyatukan praktikum partikel dalam kotak dengan ekosistem ChemCompute yang telah dibahas pada Bab 2.

Penggunaan ChemCompute Jupyter memiliki beberapa keuntungan. Pertama, mahasiswa tetap berada dalam lingkungan laboratorium komputasi berbasis web. Kedua, dosen dapat menyediakan notebook praktikum dalam format yang seragam. Ketiga, mahasiswa dapat mengalami hubungan antara notebook konseptual dan platform kimia komputasi. Keempat, jalur ini membantu memperkenalkan bahwa ChemCompute tidak hanya berhubungan dengan input GAMESS, tetapi juga dapat mendukung notebook pembelajaran jika fasilitasnya tersedia.

Dalam Praktikum 1, ChemCompute Jupyter dapat digunakan untuk menjalankan notebook yang memuat:

Perhitungan energi E_n
Visualisasi $\psi_n(x)$
Visualisasi $\psi_n^2(x)$
Simulasi perubahan panjang kotak
Ekspor tabel energi
Pertanyaan analisis

Namun, penggunaan ChemCompute Jupyter harus bersifat **opsional**. Praktikum ini tidak boleh bergantung sepenuhnya pada ketersediaan ChemCompute Jupyter, karena akses paket, eksperimen, atau layanan dapat berbeda menurut waktu dan institusi. Jika ChemCompute Jupyter tidak tersedia, mahasiswa tetap dapat menjalankan praktikum melalui Jupyter lokal atau Google Colab. Prinsip utamanya adalah mahasiswa memahami model partikel dalam kotak, bukan terikat pada satu platform.

Secara kritis, penggunaan ChemCompute Jupyter juga perlu dijaga agar tidak menjadi “black box notebook”. Jika dosen menyediakan notebook siap pakai, mahasiswa harus tetap membaca kode, mengganti parameter, menjalankan ulang, dan menafsirkan hasil. Notebook siap pakai memang membantu pembelajaran, tetapi dapat mengurangi keterlibatan aktif jika mahasiswa hanya menjalankan semua sel tanpa memahami isinya. Oleh karena itu, dosen sebaiknya memberi tugas modifikasi, misalnya:

1. Ubah panjang kotak L.
2. Bandingkan energi untuk massa elektron dan massa proton.
3. Tambahkan grafik untuk $n = 4$ dan $n = 5$.
4. Hitung jumlah simpul dari grafik.
5. Jelaskan perubahan energi ketika L diperbesar dua kali.

Dengan tugas modifikasi, mahasiswa tidak hanya menjadi pengguna notebook, tetapi peneliti pemula yang mengeksplorasi model.

5. Spreadsheet sebagai Pembanding

Spreadsheet digunakan sebagai pembanding, bukan sebagai alat utama. Yang dimaksud spreadsheet di sini dapat berupa Microsoft Excel, LibreOffice Calc, Google Sheets, atau aplikasi sejenis. Microsoft menyatakan bahwa Excel dapat digunakan untuk mengorganisasi, menganalisis, dan memvisualisasikan data, sedangkan LibreOffice Calc dideskripsikan sebagai spreadsheet kaya fitur untuk analisis data, perhitungan, dan visualisasi yang jelas. (microsoft.com)

Dalam Praktikum 1, spreadsheet dapat digunakan untuk menghitung tabel energi sederhana:

n	E_n (J)	E_n (eV)
1	...	...
2	...	...
3	...	...
4	...	...
5	...	...

Spreadsheet juga dapat digunakan untuk membuat grafik energi terhadap n . Dengan spreadsheet, mahasiswa yang belum terbiasa dengan Python dapat memeriksa apakah hasil Python masuk akal. Spreadsheet berfungsi sebagai alat validasi sederhana dan pembanding pedagogis.

Namun, spreadsheet memiliki keterbatasan penting. Formula dapat tersembunyi di sel, mudah tersalin keliru, sulit ditelusuri dalam proyek besar, dan kurang ideal untuk menghasilkan workflow reproduktibel yang kompleks. Kajian tentang risiko spreadsheet menekankan bahwa spreadsheet dapat sangat fleksibel dan kuat, tetapi juga intensif secara manual serta rawan kesalahan jika tidak dikelola dengan kontrol yang baik. ([arXiv](https://arxiv.org/abs/1908.09467)) Karena itu, spreadsheet tidak dijadikan alat utama dalam buku ini.

Dalam praktikum ini, spreadsheet dapat digunakan untuk tiga tujuan:

1. Mengecek hasil energi E_n dari Python.
2. Membuat grafik energi terhadap n sebagai pembanding.
3. Membantu mahasiswa memahami rumus sebelum masuk ke kode Python.

Spreadsheet tidak disarankan untuk membuat grafik $\psi_n(x)$ dan $\psi_n^2(x)$ untuk banyak nilai n jika data titik sangat banyak, karena pengelolaannya menjadi kurang efisien. Python lebih tepat untuk membuat grid x dengan ratusan atau ribuan titik dan memplot beberapa fungsi sekaligus.

6. Perbandingan Fungsi Software

Agar mahasiswa memahami peran masing-masing alat, berikut perbandingan fungsinya dalam Praktikum 1.

Software	Fungsi Utama	Kelebihan	Keterbatasan
Python	Menjalankan perhitungan dan analisis numerik	Transparan, fleksibel, reproduisibel	Perlu pemahaman kode dan satuan
Jupyter Notebook	Menggabungkan teks, kode, grafik, dan interpretasi	Cocok untuk pembelajaran interaktif	Rentan eksekusi sel tidak berurutan
Google Colab	Menjalankan notebook tanpa instalasi lokal	Mudah diakses, cocok untuk daring	Bergantung internet dan runtime cloud
ChemCompute Jupyter	Notebook dalam ekosistem ChemCompute	Terintegrasi dengan platform komputasi pendidikan	Bergantung ketersediaan layanan
Spreadsheet	Pembandingan tabel dan grafik sederhana	Familiar, mudah untuk cek awal	Rawan salah formula, kurang reproduisibel untuk workflow kompleks

Tabel ini menunjukkan bahwa tidak ada satu software yang sempurna untuk semua kebutuhan. Python kuat untuk analisis. Jupyter kuat untuk narasi komputasional. Colab kuat untuk akses. ChemCompute Jupyter kuat untuk integrasi laboratorium web. Spreadsheet kuat untuk pembandingan sederhana. Praktikum ini memanfaatkan kekuatan masing-masing secara proporsional.

7. Alur Pemilihan Software dalam Praktikum

Dalam pelaksanaan kelas, dosen dapat memilih jalur praktikum berdasarkan kondisi mahasiswa dan fasilitas.

Jalur 1: Python lokal + Jupyter Notebook

Jalur ini ideal jika mahasiswa sudah menginstal Python, Jupyter, dan paket dasar seperti NumPy, pandas, dan Matplotlib. Jalur ini paling baik untuk membangun kemandirian komputasi karena mahasiswa bekerja di komputer sendiri, mengelola folder sendiri, dan menyimpan hasil secara lokal.

Jalur 2: Google Colab

Jalur ini ideal jika kelas memiliki kendala instalasi. Dosen dapat membagikan notebook template, lalu mahasiswa menjalankannya melalui browser. Jalur ini cepat dan inklusif, tetapi perlu disiplin penyimpanan hasil.

Jalur 3: ChemCompute Jupyter jika tersedia

Jalur ini ideal jika dosen ingin menyatukan praktikum dengan ekosistem ChemCompute. Jalur ini juga baik untuk memperkenalkan notebook dalam lingkungan laboratorium kimia komputasi berbasis web.

Jalur 4: Spreadsheet sebagai pembanding

Jalur ini digunakan untuk validasi manual sederhana. Mahasiswa dapat menghitung E_n dalam spreadsheet dan membandingkannya dengan output Python. Jika hasil berbeda, mahasiswa harus mencari sumber kesalahan: rumus, satuan, konstanta, atau format angka.

Pilihan jalur tidak boleh mengubah tujuan praktikum. Apa pun softwarenya, mahasiswa tetap harus memahami kuantisasi energi, fungsi gelombang, rapat probabilitas, simpul, dan pengaruh panjang kotak terhadap energi.

8. Kebutuhan Paket Python

Untuk menjalankan Praktikum 1, paket Python minimum adalah:

```
numpy
pandas
matplotlib
```

NumPy digunakan untuk menghitung array x , nilai energi, fungsi gelombang, dan rapat probabilitas. Pandas digunakan untuk membuat tabel energi dan mengekspor CSV. Matplotlib digunakan untuk membuat grafik ψ , ψ^2 , dan energi terhadap n . Paket tambahan seperti SciPy dan SymPy dapat digunakan jika dosen ingin memperluas praktikum, misalnya untuk integrasi numerik ψ^2 atau pembuktian simbolik normalisasi, tetapi tidak wajib untuk jalur dasar.

Struktur import yang disarankan adalah:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
```

Dengan tiga import tersebut, mahasiswa sudah dapat menjalankan seluruh praktikum dasar. Kesederhanaan ini penting karena Praktikum 1 bertujuan memperkuat konsep, bukan membebani mahasiswa dengan banyak paket.

9. Struktur Folder Praktikum

Software yang digunakan harus ditempatkan dalam struktur folder yang tertib. Struktur yang disarankan adalah:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── input/
└── output/
```



```
├─ python/
│   └─ praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├─ gambar/
├─ laporan/
└─ data/
```

Jika menggunakan Jupyter Notebook, file dapat disimpan sebagai:

```
python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb
```

Jika menggunakan Google Colab, notebook harus diunduh atau disimpan ke Google Drive, lalu hasil CSV dan gambar harus dikumpulkan. Jika menggunakan spreadsheet, file spreadsheet dapat disimpan di folder `data/` atau `output/`, misalnya:

```
data/pembandingan_spreadsheet_energi.xlsx
```

Namun, file utama tetap kode Python atau notebook. Spreadsheet hanya pembandingan.

10. Contoh Pembagian Peran Software pada Satu Praktikum

Satu kegiatan praktikum dapat menggabungkan beberapa software secara berurutan.

Pertama, mahasiswa menjalankan Python atau Jupyter untuk menghitung energi E_n . Hasilnya diekspor menjadi CSV. Kedua, mahasiswa membuka CSV tersebut di spreadsheet untuk memeriksa tabel energi. Ketiga, mahasiswa membuat grafik ψ dan ψ^2 di Python. Keempat, mahasiswa membandingkan grafik energi Python dengan grafik spreadsheet. Kelima, jika ChemCompute Jupyter tersedia, mahasiswa menjalankan notebook yang sama di ChemCompute dan membandingkan hasilnya.

Alur tersebut dapat ditulis:

```
Python/Jupyter → hitung dan plot
CSV → simpan data
Spreadsheet → cek tabel sederhana
ChemCompute Jupyter/Colab → alternatif eksekusi
Laporan → analisis konseptual
```

Dengan alur ini, mahasiswa belajar bahwa software bukan tujuan akhir. Software adalah alat untuk memahami konsep. Jika hasil Python, Colab, ChemCompute Jupyter, dan spreadsheet konsisten, mahasiswa memperoleh keyakinan bahwa rumus dan kode benar. Jika hasil berbeda, mahasiswa belajar melakukan debugging ilmiah.

11. Analisis Kritis terhadap Penggunaan Software

Penggunaan software dalam praktikum kimia kuantum harus selalu disertai analisis kritis. Software dapat mempercepat perhitungan, tetapi juga dapat menyembunyikan kesalahan. Jika mahasiswa hanya menjalankan notebook tanpa memahami rumus, praktikum kehilangan makna. Jika mahasiswa hanya membuat grafik tanpa memahami ψ dan ψ^2 , grafik menjadi dekorasi. Jika

mahasiswa hanya menggunakan spreadsheet tanpa memeriksa formula, hasil bisa salah. Jika mahasiswa hanya mengandalkan Colab tanpa menyimpan file, data bisa hilang.

Analisis kritis pertama adalah tentang **black box**. Pada Praktikum 1, risiko black box relatif kecil karena rumusnya sederhana. Namun, risiko tetap ada jika dosen memberikan notebook lengkap dan mahasiswa hanya menekan “Run All”. Karena itu, mahasiswa harus diminta mengubah parameter, menjelaskan setiap grafik, dan menjawab pertanyaan diskusi. Mereka harus menunjukkan bahwa mereka memahami mengapa energi meningkat dengan n^2 dan mengapa energi menurun ketika L membesar.

Analisis kritis kedua adalah tentang **reproduktibilitas**. Jupyter dan Colab sangat nyaman, tetapi hasil harus dapat dijalankan ulang. Notebook yang tidak dijalankan dari awal sampai akhir belum layak dikumpulkan. Script Python yang membaca file dari folder pribadi juga belum reproduktibel. Spreadsheet yang tidak mencantumkan formula secara jelas juga sulit diperiksa.

Analisis kritis ketiga adalah tentang **validasi silang**. Praktikum ini memberi peluang baik untuk membandingkan hasil Python dan spreadsheet. Jika keduanya memberikan hasil sama, mahasiswa belajar bahwa model numerik konsisten. Jika berbeda, mahasiswa harus menelusuri penyebabnya. Aktivitas validasi silang ini sangat penting untuk membangun sikap ilmiah.

12. Implikasi Pedagogis

Pemilihan software pada Praktikum 1 memiliki implikasi pedagogis yang besar. Python dan Jupyter membantu mahasiswa memahami bahwa teori kuantum dapat diterjemahkan menjadi kode dan grafik. Google Colab memastikan mahasiswa tidak terhambat instalasi. ChemCompute Jupyter, jika tersedia, menghubungkan praktikum konseptual dengan ekosistem kimia komputasi berbasis web. Spreadsheet membantu mahasiswa memeriksa hasil dasar dengan alat yang familiar.

Dengan kombinasi ini, praktikum menjadi inklusif dan bertahap. Mahasiswa yang belum mahir Python tetap dapat mengikuti melalui Colab dan spreadsheet. Mahasiswa yang lebih mahir dapat menjalankan Python lokal, mengubah kode, menambahkan grafik, atau memperluas simulasi. Dosen dapat menyesuaikan kedalaman praktikum sesuai tingkat kelas.

Yang paling penting, software dipakai untuk membangun pemahaman, bukan menggantikan pemahaman. Mahasiswa harus tetap mampu menjelaskan:

1. Mengapa n dimulai dari 1.
2. Mengapa energi bergantung pada n^2 .
3. Mengapa ψ dapat bernilai negatif tetapi ψ^2 tidak.
4. Mengapa simpul berarti probabilitas nol.
5. Mengapa energi meningkat ketika panjang kotak mengecil.
6. Mengapa model ini relevan secara kualitatif untuk elektron π .

Jika mahasiswa dapat menjelaskan enam hal tersebut sambil menunjukkan kode dan grafik, maka software telah digunakan secara benar.

13. Persiapan Sebelum Masuk ke Jalur ChemCompute

Subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Sebelum masuk ke jalur tersebut, mahasiswa perlu memahami bahwa ChemCompute bukan satu-satunya cara menjalankan praktikum ini. Jalur ChemCompute digunakan jika dosen menyediakan notebook atau jika platform mendukung eksperimen Jupyter yang relevan. Jika tidak tersedia, praktikum tetap dapat dijalankan dengan Python lokal atau Google Colab.

Persiapan minimal sebelum masuk ke subbab berikutnya adalah:

1. Mahasiswa memahami fungsi Python, Jupyter, Colab, ChemCompute Jupyter, dan spreadsheet.
2. Mahasiswa memiliki akses ke salah satu jalur utama: Jupyter lokal, Colab, atau ChemCompute Jupyter.
3. Mahasiswa menyiapkan folder praktikum.
4. Mahasiswa memahami bahwa output utama berupa tabel energi, grafik ψ , grafik ψ^2 , grafik energi terhadap n , dan file CSV.
5. Mahasiswa siap menjalankan notebook atau script sesuai jalur yang dipilih.

Dengan pemahaman ini, mahasiswa dapat masuk ke subbab 4.4 yang membahas jalur ChemCompute secara lebih operasional.

4.4 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute adalah cara menjalankan Praktikum 1 melalui lingkungan komputasi berbasis web, khususnya melalui **Jupyter Notebook** yang tersedia atau disediakan dalam ekosistem ChemCompute jika fasilitas tersebut dapat diakses oleh kelas. Pada jalur ini, mahasiswa tidak perlu menginstal Python secara lokal terlebih dahulu. Mahasiswa menggunakan browser untuk membuka ChemCompute, mengakses notebook, menjalankan kode Python, menghitung energi partikel dalam kotak, membuat grafik fungsi gelombang, membuat grafik rapat probabilitas, serta mengunduh hasil perhitungan untuk laporan.

ChemCompute dirancang sebagai platform kimia komputasi untuk pengajaran dan riset sarjana tanpa pengguna harus menangani kompilasi, instalasi, serta pemeliharaan software dan hardware lokal. Halaman paket ChemCompute juga menyatakan bahwa pengguna dapat memilih paket kimia, dan bahwa GAMESS serta Jupyter Notebooks memiliki eksperimen siap pakai untuk digunakan dalam kelas. ([ChemCompute](#)) Karena itu, ChemCompute dapat ditempatkan sebagai **laboratorium komputasi berbasis web** yang membantu dosen memperkenalkan komputasi kimia kepada mahasiswa dengan hambatan teknis lebih rendah.

Dalam Praktikum 1, ChemCompute tidak digunakan untuk menjalankan perhitungan struktur elektronik molekul seperti optimasi geometri atau DFT. Model partikel dalam kotak memiliki rumus analitik yang cukup dihitung dengan Python. Karena itu, jalur ChemCompute pada subbab ini berarti menggunakan **ChemCompute/Jupyter Notebook** sebagai ruang eksekusi notebook perhitungan, bukan menjalankan input GAMESS untuk sistem molekul. Perbedaan ini penting agar mahasiswa tidak salah paham. ChemCompute adalah platform; Jupyter Notebook adalah

lingkungan komputasi interaktif; Python adalah bahasa yang menjalankan rumus partikel dalam kotak.

Secara pedagogis, jalur ChemCompute memiliki tiga fungsi utama. Pertama, mengurangi hambatan instalasi Python lokal. Kedua, memberi pengalaman bekerja dalam laboratorium komputasi berbasis web. Ketiga, memperkenalkan notebook sebagai dokumen komputasional yang dapat memuat teori, kode, hasil, grafik, dan interpretasi. Fungsi ketiga sangat penting karena Jupyter Notebook dikenal sebagai format yang mendukung alur kerja komputasional reproduibel, yaitu menyatukan kode, narasi, dan output dalam satu dokumen. ([ChemCompute](#))

1. Makna Jalur ChemCompute dalam Praktikum Ini

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 1 harus dipahami sebagai **jalur eksekusi notebook**, bukan jalur perhitungan kimia kuantum molekuler penuh. Pada bab-bab berikutnya, ChemCompute dapat digunakan untuk menjalankan job GAMESS, Psi4, atau paket komputasi lain yang tersedia. Namun, pada model partikel dalam kotak, perhitungan cukup dilakukan menggunakan Python karena rumus energi dan fungsi gelombang sudah diketahui secara analitik.

Dengan demikian, ChemCompute/Jupyter dalam Praktikum 1 berfungsi sebagai tempat untuk:

1. Menulis dan menjalankan kode Python.
2. Menghitung energi E_n untuk $n = 1$ sampai 5.
3. Membuat fungsi gelombang $\psi_n(x)$.
4. Menghitung rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$.
5. Membuat grafik ψ dan ψ^2 .
6. Membuat grafik energi terhadap n .
7. Menyimulasikan perubahan panjang kotak L .
8. Mengekspor tabel hasil dan grafik.
9. Menyusun catatan analisis dalam notebook.

Jalur ini cocok untuk kelas yang ingin memulai praktikum komputasi tanpa menghabiskan banyak waktu untuk instalasi. Dosen dapat menyediakan notebook awal, lalu mahasiswa menjalankannya, memodifikasi parameter, dan menuliskan analisis. ChemCompute membantu menyediakan akses, sedangkan pemahaman tetap dibangun melalui isi notebook dan diskusi.

Namun, jalur ChemCompute tidak boleh membuat mahasiswa menjadi pengguna pasif. Jika mahasiswa hanya membuka notebook, menekan **Run All**, lalu mengunduh grafik tanpa memahami kode, tujuan praktikum tidak tercapai. Mahasiswa harus membaca rumus, memeriksa konstanta, memahami fungsi, mengubah parameter, membandingkan grafik, dan menjelaskan hasil. Dengan kata lain, ChemCompute adalah sarana, bukan pengganti berpikir.

2. Latar Historis: Dari Instalasi Lokal ke Notebook Berbasis Web

Secara historis, praktikum komputasi kimia sering memerlukan instalasi software lokal atau akses ke server kampus. Mahasiswa harus memasang program, mengatur dependensi, menulis input, menjalankan perintah terminal, dan membaca output. Untuk kelas sarjana, hambatan teknis ini

sering cukup besar. ChemCompute muncul sebagai salah satu jawaban pendidikan terhadap persoalan tersebut: antarmuka web dibuat untuk memudahkan mahasiswa menggunakan GAMESS dan software bebas lain, serta mengelola bagian yang paling memakan waktu dalam kimia komputasi, yaitu proses perhitungan itu sendiri. ([ACS Publications](#))

Perkembangan notebook interaktif juga mengubah cara komputasi diajarkan. Notebook memungkinkan kode, teks, persamaan, dan grafik berada dalam satu dokumen. Dalam pendidikan kimia, bentuk ini sangat berguna karena mahasiswa tidak hanya melihat output akhir, tetapi dapat mengikuti proses komputasi secara bertahap. Untuk model partikel dalam kotak, notebook sangat ideal karena mahasiswa dapat membaca teori singkat, menjalankan rumus energi, melihat grafik fungsi gelombang, lalu langsung menulis interpretasi di bawah grafik.

ChemCompute/Jupyter menggabungkan dua perkembangan tersebut: akses berbasis web dan format notebook. Dengan demikian, mahasiswa tidak hanya memperoleh kemudahan akses, tetapi juga pengalaman menyusun dokumen komputasional yang reproduibel. Halaman ChemCompute untuk pengajar menyebut bahwa situs tersebut memungkinkan mahasiswa mengakses software komputasi mutakhir secara gratis dan membantu dosen memasukkan kimia komputasi ke kurikulum sarjana tanpa harus menangani kompilasi, instalasi, serta pemeliharaan software dan hardware. ([ChemCompute](#))

3. Posisi ChemCompute/Jupyter dalam Alur Praktikum

Dalam alur Praktikum 1, ChemCompute/Jupyter berada pada tahap eksekusi dan analisis. Alurnya dapat ditulis sebagai berikut:

```
Persiapan akun ChemCompute
→ membuka Jupyter Notebook
→ menjalankan notebook partikel dalam kotak
→ memeriksa tabel energi
→ memeriksa grafik  $\psi$  dan  $\psi^2$ 
→ mengubah parameter L dan n
→ mengekspor CSV dan gambar
→ menulis analisis
→ mengunduh notebook dan hasil
```

Alur ini berbeda dari jalur Python mandiri yang akan dibahas pada subbab 4.5. Pada jalur Python mandiri, mahasiswa membuat atau menjalankan file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` di komputer sendiri, Google Colab, atau VS Code. Pada jalur ChemCompute, mahasiswa menjalankan notebook melalui platform web jika tersedia. Namun, hasil yang diharapkan tetap sama: tabel energi, grafik fungsi gelombang, grafik rapat probabilitas, grafik energi terhadap n, file CSV, dan analisis.

Jalur ChemCompute sebaiknya ditempatkan sebagai jalur **terbimbing**. Dosen dapat menyediakan notebook awal dengan struktur yang sudah disiapkan:

1. Judul dan tujuan praktikum
2. Dasar teori singkat
3. Import pustaka
4. Definisi konstanta

5. Definisi fungsi energi dan fungsi gelombang
6. Perhitungan energi
7. Grafik ψ
8. Grafik ψ^2
9. Simulasi perubahan panjang kotak
10. Ekspor data
11. Pertanyaan analisis

Struktur semacam ini membuat mahasiswa tidak tersesat secara teknis, tetapi tetap memiliki ruang eksplorasi. Mahasiswa dapat diminta mengubah nilai panjang kotak, menambah rentang n , membandingkan massa elektron dan proton, atau menambahkan grafik baru.

4. Persiapan Sebelum Menggunakan ChemCompute/Jupyter

Sebelum menggunakan jalur ChemCompute, mahasiswa perlu menyiapkan beberapa hal. Pertama, mahasiswa harus memiliki akses internet yang stabil. Karena ChemCompute berbasis web, koneksi internet menjadi syarat utama. Kedua, mahasiswa perlu membuka platform ChemCompute dan melakukan login atau registrasi jika diperlukan. Halaman utama ChemCompute menyebutkan bahwa pengguna dapat login atau register untuk memperoleh akses penuh ke sistem. ([ChemCompute](#)) Ketiga, mahasiswa perlu mengetahui apakah kelas menyediakan notebook khusus Praktikum 1 atau apakah dosen memberikan tautan notebook yang harus dijalankan.

Persiapan teknis minimal meliputi:

1. Browser modern yang dapat membuka Jupyter Notebook.
2. Akun ChemCompute jika diperlukan.
3. Folder lokal untuk menyimpan hasil.
4. Nama file praktikum yang jelas.
5. Template notebook dari dosen jika tersedia.
6. Instruksi pengunduhan notebook, CSV, dan gambar.

Mahasiswa juga harus menyiapkan struktur folder di komputer lokal, walaupun praktikum dijalankan di web. Struktur folder tetap mengikuti standar Bab 2:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── input/
├── output/
├── python/
├── gambar/
├── laporan/
└── data/
```

Notebook yang diunduh dari ChemCompute dapat disimpan di folder `python/` atau folder khusus notebook. File CSV disimpan di `data/`. Gambar disimpan di `gambar/`. Catatan hasil eksekusi atau output notebook dapat disimpan di `output/`. Laporan disimpan di `laporan/`.

5. Langkah Operasional Jalur ChemCompute

Langkah operasional jalur ChemCompute dapat disusun sebagai prosedur praktikum berikut.

Langkah 1 — Masuk ke ChemCompute

Mahasiswa membuka ChemCompute melalui browser dan masuk ke akun jika diminta. Tahap ini penting untuk memastikan mahasiswa dapat menyimpan atau mengakses pekerjaan sesuai fasilitas platform. Jika dosen menyediakan instruksi khusus kelas, mahasiswa mengikuti instruksi tersebut.

Langkah 2 — Memilih Jupyter Notebook

Mahasiswa memilih fasilitas Jupyter Notebook jika tersedia. Halaman paket ChemCompute menyebut bahwa Jupyter Notebooks termasuk paket yang memiliki eksperimen siap pakai untuk kelas. ([ChemCompute](#)) Jika notebook Praktikum 1 sudah disediakan dosen, mahasiswa membuka notebook tersebut. Jika belum tersedia, dosen dapat menyediakan notebook sendiri atau mahasiswa menggunakan jalur Python mandiri pada subbab 4.5.

Langkah 3 — Membaca Tujuan dan Dasar Teori di Notebook

Sebelum menjalankan kode, mahasiswa membaca bagian tujuan dan dasar teori. Ini penting karena notebook bukan hanya file kode, melainkan dokumen pembelajaran. Mahasiswa harus memahami bahwa praktikum akan menghitung E_n , $\psi_n(x)$, $\psi_n^2(x)$, simpul, dan efek perubahan panjang kotak.

Langkah 4 — Menjalankan Sel Import Pustaka

Notebook biasanya dimulai dengan import pustaka:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
```

Mahasiswa harus memastikan sel ini berjalan tanpa error. Jika muncul `ModuleNotFoundError`, berarti paket belum tersedia di environment notebook. Pada kasus ini, mahasiswa mengikuti instruksi dosen atau menggunakan lingkungan lain seperti Google Colab atau Python lokal.

Langkah 5 — Menjalankan Sel Konstanta dan Parameter

Mahasiswa menjalankan sel yang mendefinisikan konstanta fisika:

```
h = 6.62607015e-34
m_e = 9.1093837015e-31
joule_to_ev = 1 / 1.602176634e-19
L = 1.0e-9
```

Mahasiswa harus membaca satuan. h dalam J s, m_e dalam kg, dan L dalam meter. Jika satuan tidak dipahami, hasil energi dapat salah ditafsirkan.

Langkah 6 — Menjalankan Sel Fungsi Energi dan Fungsi Gelombang

Mahasiswa menjalankan fungsi:

```
def energi_partikel_kotak(n, L, m):
    return (n2 * h2) / (8 * m * L2)

def psi_n(n, x, L):
    return np.sqrt(2/L) * np.sin(n * np.pi * x / L)
```

Dua fungsi ini adalah inti praktikum. Fungsi pertama menghitung energi, fungsi kedua menghitung fungsi gelombang. Mahasiswa harus mampu menjelaskan isi dua fungsi ini dalam laporan.

Langkah 7 — Menghitung Energi

Mahasiswa menjalankan kode untuk $n = 1$ sampai 5. Hasilnya disusun sebagai tabel dalam joule dan elektronvolt. Tabel ini menjadi salah satu output wajib.

Langkah 8 — Membuat Grafik ψ dan ψ^2

Mahasiswa menjalankan sel grafik fungsi gelombang dan rapat probabilitas. Grafik harus diperiksa: apakah $n = 1$ tidak memiliki simpul internal, apakah $n = 2$ memiliki satu simpul, apakah ψ^2 selalu tidak negatif, dan apakah batas $x = 0$ serta $x = L$ bernilai nol.

Langkah 9 — Simulasi Perubahan Panjang Kotak

Mahasiswa mengubah nilai L , misalnya 0,5 nm, 1,0 nm, 1,5 nm, dan 2,0 nm. Energi dihitung ulang. Mahasiswa mengamati bahwa energi meningkat ketika L mengecil dan menurun ketika L membesar. Simulasi ini membantu menghubungkan persamaan $E_n \propto 1/L^2$ dengan data numerik.

Langkah 10 — Ekspor Hasil

Mahasiswa menyimpan tabel energi sebagai CSV dan grafik sebagai PNG. Jika notebook tidak memungkinkan penyimpanan langsung ke folder lokal, mahasiswa mengunduh file dari sesi notebook atau menyalin output sesuai instruksi dosen. Prinsipnya, hasil tidak boleh hanya tinggal di layar.

Langkah 11 — Unduh Notebook

Mahasiswa mengunduh notebook `.ipynb` setelah semua sel dijalankan. Notebook ini menjadi bukti proses komputasi. Jika memungkinkan, mahasiswa juga mengeksport notebook ke HTML atau PDF untuk arsip pembacaan.

Langkah 12 — Tulis Analisis

Mahasiswa menulis analisis pada laporan: hubungan n dengan energi, hubungan n dengan simpul, perbedaan ψ dan ψ^2 , hubungan L dengan energi, serta relevansi model terhadap elektron π .

6. Struktur Notebook yang Disarankan

Notebook ChemCompute untuk Praktikum 1 sebaiknya memiliki struktur berikut.

Judul:

Praktikum 1: Visualisasi Fungsi Gelombang dan Partikel dalam Kotak

Bagian 1:

Tujuan Praktikum

Bagian 2:

Dasar Teori Singkat

Bagian 3:

Import Pustaka

Bagian 4:

Definisi Konstanta dan Parameter

Bagian 5:

Definisi Fungsi Energi dan Fungsi Gelombang

Bagian 6:

Perhitungan Energi untuk $n = 1$ sampai 5

Bagian 7:

Grafik Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$

Bagian 8:

Grafik Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$

Bagian 9:

Simulasi Perubahan Panjang Kotak L

Bagian 10:

Ekspor CSV dan Gambar

Bagian 11:

Pertanyaan Analisis

Bagian 12:

Kesimpulan Numerik

Struktur ini sejalan dengan Bab 3 tentang struktur kode praktikum. Notebook tidak boleh berisi kode acak tanpa judul dan komentar. Setiap bagian harus memiliki tujuan. Dengan demikian, mahasiswa memahami alur dari teori ke perhitungan, dari perhitungan ke grafik, dan dari grafik ke analisis.

7. Contoh Isi Notebook ChemCompute

Berikut contoh isi minimal notebook yang dapat dijalankan melalui ChemCompute/Jupyter jika fasilitas tersedia. Contoh ini bukan pengganti subbab 4.5 yang akan memberikan jalur Python mandiri lebih lengkap, tetapi memberi gambaran operasional jalur ChemCompute.

```

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

h = 6.62607015e-34      # J s
m_e = 9.1093837015e-31  # kg
joule_to_ev = 1 / 1.602176634e-19

L = 1.0e-9              # meter
n_values = np.arange(1, 6)

def energi_partikel_kotak(n, L, m):
    return (n2 * h2) / (8 * m * L2)

def psi_n(n, x, L):
    return np.sqrt(2/L) * np.sin(n * np.pi * x / L)

energi_joule = energi_partikel_kotak(n_values, L, m_e)
energi_ev = energi_joule * joule_to_ev

tabel_energi = pd.DataFrame({
    "n": n_values,
    "energi_joule": energi_joule,
    "energi_ev": energi_ev
})

tabel_energi

```

Grafik fungsi gelombang:

```

x = np.linspace(0, L, 1000)

plt.figure()
for n in n_values:
    psi = psi_n(n, x, L)
    plt.plot(x * 1e9, psi, label=f"n = {n}")

plt.xlabel("x (nm)")
plt.ylabel("Ψn(x)")
plt.title("Fungsi Gelombang Partikel dalam Kotak")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

```

Grafik rapat probabilitas:

```

plt.figure()
for n in n_values:
    psi = psi_n(n, x, L)
    probabilitas = psi2
    plt.plot(x * 1e9, probabilitas, label=f"n = {n}")

plt.xlabel("x (nm)")
plt.ylabel("Ψn2(x)")
plt.title("Rapat Probabilitas Partikel dalam Kotak")

```

```
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Grafik energi terhadap n :

```
plt.figure()
plt.plot(tabel_energi["n"], tabel_energi["energi_ev"], marker="o")
plt.xlabel("Bilangan kuantum n")
plt.ylabel("Energi (eV)")
plt.title("Energi terhadap Bilangan Kuantum")
plt.grid(True)
plt.show()
```

Kode tersebut cukup untuk menunjukkan konsep utama. Namun, dalam praktikum lengkap, mahasiswa harus menambahkan ekspor CSV dan gambar, serta analisis tertulis.

8. Ekspor Output dari Jalur ChemCompute

Output jalur ChemCompute harus disimpan secara tertib. Output minimal meliputi:

1. Notebook .ipynb.
2. Tabel energi dalam CSV.
3. Grafik ψ .
4. Grafik ψ^2 .
5. Grafik energi terhadap n .
6. Catatan analisis.

Jika menggunakan notebook, tabel CSV dapat dibuat dengan:

```
tabel_energi.to_csv("energi_partikel_dalam_kotak.csv", index=False)
```

Grafik dapat disimpan dengan:

```
plt.savefig("fungsi_gelombang.png", dpi=300, bbox_inches="tight")
```

Pada platform notebook berbasis web, lokasi penyimpanan file dapat berbeda dari komputer lokal. Oleh karena itu, mahasiswa harus memastikan file benar-benar dapat diunduh. Jika file hanya tersimpan di sesi sementara, file dapat hilang ketika sesi berakhir. Ini adalah risiko umum lingkungan notebook berbasis cloud. Studi reproducibility notebook juga menunjukkan bahwa notebook dapat mengalami masalah reproduksi jika dependensi, file, atau lingkungan eksekusi tidak dikelola dengan baik. ([arXiv](#))

Setelah file diunduh, susun dalam folder lokal:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── python/
│   └── praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb
└── data/
```

```

├── energi_partikel_dalam_kotak.csv
├── gambar/
│   ├── fungsi_gelombang.png
│   ├── rapat_probabilitas.png
│   └── energi_terhadap_n.png
├── laporan/
│   └── laporan_praktikum_01.docx

```

Struktur ini membuat hasil jalur ChemCompute tetap reproduibel dan dapat dinilai.

9. Validasi Hasil Jalur ChemCompute

Validasi adalah proses memastikan bahwa hasil yang diperoleh benar secara numerik dan sesuai teori. Pada Praktikum 1, validasi dapat dilakukan dengan beberapa cara.

Pertama, cek nilai n . Nilai n harus dimulai dari 1, bukan 0. Jika notebook menghasilkan energi untuk $n = 0$, maka ada kesalahan konseptual. Kedua, cek hubungan energi. Energi $n = 2$ harus empat kali energi $n = 1$ untuk L dan m yang sama. Energi $n = 3$ harus sembilan kali energi $n = 1$. Ketiga, cek grafik ψ . Fungsi gelombang harus bernilai nol pada $x = 0$ dan $x = L$. Keempat, cek grafik ψ^2 . Rapat probabilitas tidak boleh bernilai negatif. Kelima, cek simpul. Keadaan n harus memiliki $n - 1$ simpul internal. Keenam, cek pengaruh L . Jika L diperbesar dua kali, energi harus turun menjadi seperempat.

Validasi semacam ini dapat ditulis sebagai tabel:

Pemeriksaan	Hasil yang Diharapkan
n dimulai dari 1	$n = 0$ tidak digunakan
E_2/E_1	4
E_3/E_1	9
$\psi(0)$ dan $\psi(L)$	0
ψ^2	Tidak negatif
Simpul internal	$n - 1$
L menjadi $2L$	Energi menjadi $1/4$

Mahasiswa harus memasukkan sebagian validasi ini dalam laporan. Dengan demikian, laporan tidak hanya berisi grafik, tetapi juga menunjukkan bahwa grafik dan angka diperiksa.

10. Tugas Modifikasi pada Jalur ChemCompute

Agar jalur ChemCompute tidak menjadi aktivitas pasif, dosen perlu memberi tugas modifikasi. Beberapa tugas modifikasi yang disarankan:

1. Ubah panjang kotak dari 1,0 nm menjadi 0,5 nm dan 2,0 nm.
2. Bandingkan energi keadaan dasar untuk tiga nilai L .
3. Hitung E_1 sampai E_5 untuk massa elektron dan massa proton.
4. Tambahkan grafik ψ untuk $n = 6$.
5. Hitung jumlah simpul internal untuk $n = 1$ sampai 6.

6. Buat tabel rasio E_n/E_1 .
7. Jelaskan mengapa $E_n/E_1 = n^2$.
8. Simpan grafik baru dengan nama berbeda.
9. Tambahkan sel Markdown yang menjelaskan hubungan L dan energi.
10. Buat kesimpulan numerik di akhir notebook.

Contoh tugas modifikasi sederhana:

```
L_values = np.array([0.5e-9, 1.0e-9, 1.5e-9, 2.0e-9])

energi_L = energi_partikel_kotak(1, L_values, m_e) * joule_to_ev

tabel_L = pd.DataFrame({
    "L_nm": L_values * 1e9,
    "E1_ev": energi_L
})

tabel_L
```

Mahasiswa kemudian membuat grafik E_1 terhadap L . Dari grafik tersebut, mahasiswa harus menjelaskan mengapa energi turun ketika panjang kotak bertambah.

11. Analisis Kritis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki keunggulan besar, tetapi juga memiliki keterbatasan yang harus disadari. Keunggulannya adalah aksesibilitas. Mahasiswa dapat menjalankan notebook melalui browser tanpa instalasi lokal. Dosen dapat menyediakan template yang seragam. Kelas besar dapat memulai praktikum lebih cepat. ChemCompute juga membantu mahasiswa mengenal ekosistem laboratorium komputasi berbasis web yang akan berguna pada praktikum berikutnya.

Namun, keterbatasannya juga jelas. Pertama, ketersediaan Jupyter Notebook di ChemCompute dapat bergantung pada platform, kelas, atau waktu akses. Halaman paket ChemCompute menyebut adanya Jupyter Notebooks dan eksperimen siap pakai, tetapi dosen tetap perlu memastikan fasilitas yang dibutuhkan tersedia untuk kelasnya pada saat praktikum. ([ChemCompute](#)) Kedua, akses bergantung pada internet dan server. Ketiga, file dapat hilang jika tidak diunduh. Keempat, mahasiswa dapat menjadi pasif jika notebook terlalu lengkap. Kelima, lingkungan notebook berbasis web mungkin berbeda dari lingkungan Python lokal, sehingga hasil ekspor dan jalur file perlu diperiksa.

Analisis kritis ini penting karena buku ini tidak ingin menjadikan ChemCompute sebagai satu-satunya jalur. ChemCompute adalah salah satu jalur. Jika tersedia, ia sangat membantu. Jika tidak tersedia, praktikum tetap dapat dilakukan melalui Google Colab atau Python mandiri. Yang tidak boleh berubah adalah standar akademik: kode harus jelas, data harus disimpan, grafik harus diberi label, dan kesimpulan harus didasarkan pada hasil.

12. Perbandingan Jalur ChemCompute dengan Jalur Python Mandiri

Jalur ChemCompute dan jalur Python mandiri memiliki tujuan sama, tetapi karakter berbeda.

Aspek	Jalur ChemCompute	Jalur Python Mandiri
Instalasi	Tidak memerlukan instalasi lokal besar	Memerlukan Python/Jupyter atau environment lokal
Akses	Berbasis web	Lokal atau Colab
Cocok untuk	Kelas terstruktur dan akses cepat	Kemandirian dan proyek lanjut
Risiko	Bergantung platform dan internet	Bergantung konfigurasi komputer
Output	Notebook, CSV, gambar	Script .py, CSV, gambar
Kelebihan	Mudah untuk pemula	Lebih fleksibel dan mandiri
Keterbatasan	Ketersediaan layanan	Instalasi dan manajemen paket

Perbandingan ini menunjukkan bahwa jalur ChemCompute bukan pengganti jalur Python mandiri. Jalur ChemCompute adalah pintu masuk yang baik. Jalur Python mandiri adalah penguatan kemandirian. Dalam kelas ideal, mahasiswa dapat mencoba keduanya: menjalankan notebook melalui ChemCompute, lalu menjalankan script .py secara lokal atau melalui Colab. Jika hasil sama, mahasiswa memahami bahwa model dan kode bersifat portabel.

13. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki beberapa implikasi pedagogis. Pertama, dosen dapat memulai praktikum lebih cepat karena mahasiswa tidak harus menyelesaikan masalah instalasi. Kedua, mahasiswa mengalami pembelajaran berbasis notebook yang menyatukan teori, kode, dan grafik. Ketiga, dosen dapat mengarahkan perhatian pada konsep kuantisasi, simpul, dan rapat probabilitas. Keempat, mahasiswa mulai terbiasa dengan platform kimia komputasi berbasis web yang akan digunakan kembali pada praktikum molekul nyata.

Implikasi lain adalah pemerataan akses. Mahasiswa yang komputernya tidak kuat tetap dapat mengikuti praktikum melalui browser. Ini penting dalam pendidikan kimia komputasi karena ketimpangan perangkat dapat menjadi hambatan. ChemCompute sebagai platform pendidikan berbasis web membantu mengurangi hambatan tersebut. Artikel Buragohain menggambarkan ChemCompute sebagai platform web gratis yang memberi akses ke paket struktur elektronik dan dinamika molekul open-source serta dapat digunakan untuk memperkenalkan kimia komputasi berkualitas dalam laboratorium sarjana tanpa keterbatasan finansial. ([Springer](#))

Namun, pemerataan akses harus dibarengi pemerataan pemahaman. Mahasiswa yang mendapat notebook siap pakai tetap perlu menjelaskan kode. Dosen harus menilai analisis, bukan hanya keberhasilan menjalankan notebook. Pertanyaan diskusi harus diarahkan pada pemahaman, misalnya mengapa $n = 0$ tidak diperbolehkan, mengapa ψ^2 selalu tidak negatif, mengapa energi meningkat dengan n^2 , dan bagaimana panjang kotak memengaruhi energi.

14. Contoh Format Laporan untuk Jalur ChemCompute

Jika mahasiswa menggunakan jalur ChemCompute, bagian metode dalam laporan dapat ditulis dengan format seperti berikut:

Perhitungan model partikel dalam kotak satu dimensi dilakukan melalui ChemCompute/Jupyter Notebook. Notebook memuat perhitungan energi E_n , fungsi

gelombang $\psi_n(x)$, rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$, grafik energi terhadap n , dan simulasi perubahan panjang kotak L . Perhitungan dilakukan menggunakan Python dengan pustaka NumPy, pandas, dan Matplotlib. Hasil tabel energi diekspor dalam format CSV, sedangkan grafik disimpan dalam format PNG.

Mahasiswa juga harus menyertakan metadata:

```
Platform: ChemCompute/Jupyter Notebook
Bahasa: Python
Paket: NumPy, pandas, Matplotlib
Model: Partikel dalam kotak satu dimensi
Nilai n: 1 sampai 5
Panjang kotak awal: 1,0 nm
Output: CSV dan PNG
```

Format ini membuat laporan lebih jelas dan reproduibel. Dosen dapat mengetahui platform, paket, model, parameter, dan output yang digunakan.

15. Kesalahan Umum Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum yang perlu dihindari:

1. Menjalankan notebook tanpa membaca teori.
2. Tidak mengubah parameter sama sekali.
3. Tidak mengunduh CSV dan gambar.
4. Tidak menyimpan notebook akhir.
5. Menganggap grafik sebagai hasil akhir tanpa analisis.
6. Tidak memeriksa satuan energi.
7. Menuliskan $n = 0$ sebagai keadaan yang diperbolehkan.
8. Tidak membedakan ψ dan ψ^2 .
9. Mengabaikan simpul.
10. Tidak mencatat platform dan paket yang digunakan.

Kesalahan-kesalahan ini dapat dicegah dengan checklist sebelum pengumpulan:

```
Checklist Jalur ChemCompute:
[ ] Notebook dijalankan dari awal sampai akhir.
[ ] Tabel energi muncul.
[ ] Grafik  $\psi$  muncul.
[ ] Grafik  $\psi^2$  muncul.
[ ] Grafik energi terhadap  $n$  muncul.
[ ] Simulasi perubahan  $L$  dilakukan.
[ ] CSV diunduh.
[ ] Gambar diunduh.
[ ] Notebook diunduh.
[ ] Analisis ditulis dalam laporan.
```

Checklist ini membantu mahasiswa bekerja tertib dan membantu dosen menilai kelengkapan praktikum.

16. Sintesis Subbab

Jalur ChemCompute pada Praktikum 1 adalah jalur berbasis web untuk menjalankan notebook partikel dalam kotak jika fasilitas ChemCompute/Jupyter tersedia. Jalur ini sangat berguna untuk mengurangi hambatan instalasi, memperkenalkan notebook komputasional, dan menghubungkan mahasiswa dengan ekosistem laboratorium komputasi berbasis web. Namun, jalur ini harus digunakan secara kritis. Mahasiswa tetap harus memahami rumus, menjalankan kode secara sadar, memvalidasi hasil, mengeksport data, menyimpan grafik, dan menulis analisis.

ChemCompute menyediakan akses, tetapi pemahaman tetap dibangun oleh mahasiswa. Notebook menyediakan struktur, tetapi interpretasi tetap harus ditulis. Python menghitung angka, tetapi mahasiswa harus menjelaskan maknanya. Dengan jalur ini, mahasiswa dapat mulai mengalami praktik komputasi modern tanpa terbebani instalasi, sekaligus tetap memegang prinsip reproduktibilitas dan tanggung jawab ilmiah.

Subbab berikutnya akan membahas jalur Python mandiri. Pada jalur tersebut, mahasiswa akan menyusun dan menjalankan kode `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` secara lebih lengkap untuk menghitung energi, fungsi gelombang, rapat probabilitas, grafik $n = 1$ sampai 5, tabel energi dalam joule dan elektronvolt, serta simulasi perubahan panjang kotak.

4.5 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri adalah cara menjalankan Praktikum 1 secara langsung menggunakan kode Python yang ditulis, disimpan, dijalankan, dianalisis, dan diarsipkan oleh mahasiswa sendiri. Berbeda dari jalur ChemCompute atau notebook berbasis web yang menyediakan lingkungan siap pakai, jalur Python mandiri menuntut mahasiswa membangun alur kerja komputasi secara lebih sadar: menyiapkan folder praktikum, membuat file kode, mendefinisikan konstanta, menulis fungsi, menghitung energi, memvisualisasikan fungsi gelombang, mengeksport data, menyimpan grafik, dan menafsirkan hasil. Jalur ini menjadi latihan awal kemandirian komputasi ilmiah.

Dalam praktikum ini, istilah “mandiri” tidak berarti mahasiswa bekerja tanpa panduan. Mandiri berarti mahasiswa tidak hanya menjalankan notebook yang sudah disiapkan, tetapi memahami dan mengontrol isi kode. Mahasiswa mengetahui di mana konstanta ditulis, bagaimana rumus energi diterjemahkan menjadi fungsi Python, bagaimana grid posisi x dibuat, bagaimana $\psi_n(x)$ dihitung, bagaimana $\psi_n^2(x)$ diperoleh, bagaimana tabel energi dibentuk, dan bagaimana grafik disimpan. Kemandirian semacam ini penting karena pada praktikum berikutnya mahasiswa akan berhadapan dengan output molekul nyata, file geometri, tabel energi, dan analisis yang lebih kompleks.

Secara teoritis, jalur Python mandiri didasarkan pada model partikel dalam kotak satu dimensi. Fungsi gelombang keadaan stasioner untuk partikel dalam kotak dinyatakan dalam bentuk $\psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L)$, dengan $n = 1, 2, 3$, dan seterusnya. Setiap nilai n memberikan fungsi gelombang dan keadaan energi yang berbeda; setiap kenaikan n juga menambah jumlah simpul pada fungsi gelombang. Dengan dasar tersebut, Python digunakan untuk menghitung, memvisualisasikan, dan menguji kembali hubungan antara n , ψ , ψ^2 , simpul, panjang kotak, dan energi.

Jalur Python mandiri pada Praktikum 1 wajib memuat enam komponen utama:

1. Perhitungan energi E_n .
2. Fungsi gelombang $\psi_n(x)$.
3. Rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$.
4. Grafik untuk $n = 1$ sampai 5.
5. Tabel energi dalam joule dan elektronvolt.
6. Simulasi perubahan panjang kotak L terhadap energi.

Keenam komponen tersebut bukan sekadar target teknis. Setiap komponen memiliki makna konseptual. Perhitungan E_n menunjukkan kuantisasi energi. Fungsi $\psi_n(x)$ memperlihatkan bentuk keadaan kuantum. Rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$ memperlihatkan distribusi kemungkinan posisi partikel. Grafik $n = 1$ sampai 5 memperlihatkan pertambahan simpul. Tabel energi dalam joule dan elektronvolt melatih literasi satuan. Simulasi perubahan L menunjukkan bahwa pembatasan ruang memengaruhi energi secara kuat.

1. Kedudukan Jalur Python Mandiri dalam Praktikum

Jalur Python mandiri memiliki kedudukan penting karena menjadi penghubung antara teori dan keterampilan komputasi. Pada jalur ini, mahasiswa tidak bergantung pada antarmuka web tertentu. Mahasiswa dapat menjalankan kode melalui VS Code, Jupyter Notebook lokal, terminal, Anaconda Navigator, atau Google Colab jika diperlukan. Yang utama adalah kode Python disusun secara lengkap dan dapat dijalankan ulang.

Secara metodologis, jalur Python mandiri mengajarkan bahwa komputasi ilmiah harus memiliki jejak yang jelas. File kode harus disimpan. Data hasil harus diekspor. Grafik harus disimpan. Parameter harus tertulis. Satuan harus dicantumkan. Jika hasil dimasukkan ke laporan, hasil itu harus dapat ditelusuri kembali ke kode dan data. Prinsip ini sejalan dengan standar reproduibilitas yang telah dibahas sebelumnya: hasil komputasi harus dapat diperiksa ulang melalui input, parameter, output, dan file analisis.

Dalam konteks pembelajaran, jalur ini juga membantu mahasiswa memahami bahwa Python bukan hanya kalkulator. Python adalah media berpikir ilmiah. Ketika mahasiswa menulis fungsi `energi_partikel_kotak(n, L, m)`, mereka sedang menerjemahkan persamaan fisika menjadi prosedur komputasi. Ketika mahasiswa menulis `probabilitas = psi2`, mereka sedang menerjemahkan interpretasi probabilitas Born ke dalam operasi numerik. Ketika mahasiswa membuat grafik ψ dan ψ^2 , mereka sedang mengubah objek matematika abstrak menjadi visualisasi yang dapat dianalisis.

2. Struktur Folder Jalur Python Mandiri

Sebelum menulis kode, mahasiswa harus menyiapkan struktur folder praktikum. Struktur yang disarankan adalah:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── input/
└── output/
```

```
├─ python/
│   └─ praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├─ gambar/
├─ laporan/
└─ data/
```

Pada praktikum ini, folder `input/` dapat berisi catatan parameter awal, misalnya panjang kotak dan nilai n yang digunakan. Folder `output/` dapat berisi log hasil eksekusi atau salinan tampilan ringkasan. Folder `python/` berisi file kode utama. Folder `gambar/` berisi grafik ψ , grafik ψ^2 , grafik energi terhadap n , dan grafik pengaruh panjang kotak. Folder `data/` berisi tabel energi dan hasil simulasi dalam format CSV. Folder `laporan/` berisi dokumen laporan praktikum.

Struktur ini perlu diikuti sejak praktikum pertama karena akan digunakan kembali pada praktikum berikutnya. Pada Praktikum 1, file dan data masih sederhana. Pada praktikum optimasi geometri, DFT, IR, dan energi reaksi, jumlah file akan lebih banyak. Jika sejak awal mahasiswa terbiasa menata folder dengan benar, praktikum berikutnya akan lebih tertib.

Nama file kode wajib adalah:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Nama ini harus ditulis konsisten agar mudah ditemukan dan dinilai. Jika menggunakan Jupyter Notebook, file notebook boleh diberi nama:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb
```

Namun, jalur Python mandiri dalam subbab ini menekankan file `.py` sebagai bentuk utama karena file `.py` lebih mudah dijalankan ulang dari terminal, lebih mudah disimpan sebagai script, dan lebih sesuai untuk otomasi.

3. Prinsip Teori yang Diterjemahkan ke Kode

Sebelum kode ditulis, mahasiswa harus memahami hubungan antara teori dan variabel Python. Prinsip teorinya adalah sebagai berikut:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

dan:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

serta:

$$\rho_n(x) = \psi_n^2(x)$$

Dalam Python, persamaan tersebut diterjemahkan menjadi:

```
def energi_partikel_kotak(n, L, m):
```

```

    return (n2 * h2) / (8 * m * L2)

def psi_n(n, x, L):
    return np.sqrt(2/L) * np.sin(n * np.pi * x / L)

```

Rapat probabilitas diperoleh dengan:

```
probabilitas = psi2
```

Terjemahan ini tampak sederhana, tetapi sangat penting. Mahasiswa harus dapat menjelaskan setiap simbol. n adalah bilangan kuantum. h adalah konstanta Planck. m adalah massa partikel. L adalah panjang kotak. x adalah posisi di dalam kotak. ψ adalah nilai fungsi gelombang pada titik-titik x . `probabilitas` adalah rapat probabilitas relatif.

Pada model partikel dalam kotak berdinding tak hingga, energi keadaan dasar tidak nol. Rujukan kimia kuantum menegaskan bahwa energi minimum klasik partikel dalam kotak dapat nol jika partikel diam, sedangkan model kuantum memiliki energi dasar $E_1 = h^2/(8mL^2)$ yang lebih besar dari nol. Hal ini harus tercermin dalam kode: mahasiswa tidak boleh menggunakan $n = 0$ sebagai keadaan fisik yang diperbolehkan.

4. Paket Python yang Digunakan

Jalur Python mandiri untuk Praktikum 1 hanya memerlukan tiga paket utama:

```

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

```

NumPy digunakan untuk membuat array nilai n dan array posisi x . Pandas digunakan untuk menyusun tabel energi dan mengekspor CSV. Matplotlib digunakan untuk membuat grafik. Dengan tiga paket ini, seluruh tujuan Praktikum 1 dapat dicapai.

Kelebihan penggunaan paket yang sederhana adalah mahasiswa dapat fokus pada konsep. Praktikum pertama tidak perlu menggunakan ASE, RDKit, Psi4, PySCF, atau paket kimia komputasi lain. Model partikel dalam kotak cukup dihitung dengan Python dasar dan pustaka numerik. Hal ini penting agar beban teknis tidak mengganggu pemahaman kuantisasi energi dan fungsi gelombang.

Namun, meskipun pakatnya sedikit, penggunaannya harus benar. NumPy menghasilkan array numerik. Jika satuan salah, NumPy tetap menghitung. Pandas membuat tabel. Jika kolom diberi nama tidak jelas, tabel sulit ditafsirkan. Matplotlib membuat grafik. Jika sumbu tidak diberi label, grafik tidak ilmiah. Karena itu, kode harus mengikuti standar penulisan yang telah dibahas pada Bab 3.

5. Kode Lengkap Jalur Python Mandiri

Berikut kode lengkap yang dapat digunakan sebagai dasar file:

python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py

Kode ini memuat perhitungan energi E_n , fungsi gelombang $\psi_n(x)$, rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$, grafik untuk $n = 1$ sampai 5, tabel energi dalam joule dan elektronvolt, serta simulasi perubahan panjang kotak.

```
# =====
# PRAKTIKUM 1
# VISUALISASI FUNGSI GELOMBANG DAN PARTIKEL DALAM KOTAK
#
# Nama file:
# praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
#
# Tujuan:
# 1. Menghitung energi partikel dalam kotak satu dimensi.
# 2. Memvisualisasikan fungsi gelombang  $\psi_n(x)$ .
# 3. Memvisualisasikan rapat probabilitas  $\psi_n^2(x)$ .
# 4. Menunjukkan hubungan bilangan kuantum  $n$  dengan energi.
# 5. Menunjukkan pengaruh panjang kotak  $L$  terhadap energi.
# =====

from pathlib import Path

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# =====
# 1. Definisi folder kerja
# =====

BASE_DIR = Path(__file__).resolve().parent.parent

DATA_DIR = BASE_DIR / "data"
GAMBAR_DIR = BASE_DIR / "gambar"
OUTPUT_DIR = BASE_DIR / "output"

DATA_DIR.mkdir(exist_ok=True)
GAMBAR_DIR.mkdir(exist_ok=True)
OUTPUT_DIR.mkdir(exist_ok=True)

# =====
# 2. Definisi konstanta
# =====

h = 6.62607015e-34          # Konstanta Planck, satuan J s
m_e = 9.1093837015e-31     # Massa elektron, satuan kg
joule_to_ev = 1 / 1.602176634e-19 # Faktor konversi J ke eV

# =====
# 3. Definisi fungsi
# =====
```

```

def energi_partikel_kotak(n, L, m):
    """
    Menghitung energi partikel dalam kotak satu dimensi.

    Parameter:
    n : int atau array
        Bilangan kuantum, dimulai dari 1.
    L : float
        Panjang kotak dalam meter.
    m : float
        Massa partikel dalam kg.

    Return:
    float atau array
        Energi dalam joule.
    """
    return (n2 * h2) / (8 * m * L2)

def psi_n(n, x, L):
    """
    Menghitung fungsi gelombang ternormalisasi partikel dalam kotak.

    Parameter:
    n : int
        Bilangan kuantum.
    x : array
        Posisi dalam kotak, satuan meter.
    L : float
        Panjang kotak, satuan meter.

    Return:
    array
        Nilai fungsi gelombang psi_n(x).
    """
    return np.sqrt(2 / L) * np.sin(n * np.pi * x / L)

# =====
# 4. Input data dan parameter awal
# =====

L = 1.0e-9          # Panjang kotak awal, 1 nm
n_values = np.arange(1, 6) # n = 1 sampai 5
x = np.linspace(0, L, 1000) # grid posisi dalam kotak

# =====
# 5. Perhitungan energi E_n
# =====

energi_joule = energi_partikel_kotak(n_values, L, m_e)
energi_ev = energi_joule * joule_to_ev

tabel_energi = pd.DataFrame({
    "n": n_values,
    "energi_joule": energi_joule,

```

```

        "energi_ev": energi_ev,
        "rasio_E_n_terhadap_E_1": energi_joule / energi_joule[0]
    })

# =====
# 6. Menampilkan dan menyimpan tabel energi
# =====

print("\nTabel energi partikel dalam kotak:")
print(tabel_energi)

tabel_energi.to_csv(
    DATA_DIR / "energi_partikel_dalam_kotak.csv",
    index=False
)

# =====
# 7. Grafik fungsi gelombang  $\psi_n(x)$ 
# =====

plt.figure(figsize=(8, 5))

for n in n_values:
    psi = psi_n(n, x, L)
    plt.plot(x * 1e9, psi, label=f"n = {n}")

plt.xlabel("x (nm)")
plt.ylabel(" $\psi_n(x)$ ")
plt.title("Fungsi Gelombang Partikel dalam Kotak")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.savefig(
    GAMBAR_DIR / "grafik_fungsi_gelombang_psi.png",
    dpi=300,
    bbox_inches="tight"
)
plt.show()

# =====
# 8. Grafik rapat probabilitas  $\psi_n^2(x)$ 
# =====

plt.figure(figsize=(8, 5))

for n in n_values:
    psi = psi_n(n, x, L)
    probabilitas = psi**2
    plt.plot(x * 1e9, probabilitas, label=f"n = {n}")

plt.xlabel("x (nm)")
plt.ylabel(" $\psi_n^2(x)$ ")
plt.title("Rapat Probabilitas Partikel dalam Kotak")

```



```

plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.savefig(
    GAMBAR_DIR / "grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png",
    dpi=300,
    bbox_inches="tight"
)
plt.show()

# =====
# 9. Grafik energi terhadap bilangan kuantum n
# =====

plt.figure(figsize=(7, 5))
plt.plot(tabel_energi["n"], tabel_energi["energi_ev"], marker="o")
plt.xlabel("Bilangan kuantum n")
plt.ylabel("Energi (eV)")
plt.title("Energi Partikel dalam Kotak terhadap n")
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.savefig(
    GAMBAR_DIR / "grafik_energi_terhadap_n.png",
    dpi=300,
    bbox_inches="tight"
)
plt.show()

# =====
# 10. Simulasi perubahan panjang kotak
# =====

L_values_nm = np.array([0.5, 0.75, 1.0, 1.5, 2.0])
L_values_meter = L_values_nm * 1e-9

energi_L_joule = energi_partikel_kotak(1, L_values_meter, m_e)
energi_L_ev = energi_L_joule * joule_to_ev

tabel_panjang = pd.DataFrame({
    "L_nm": L_values_nm,
    "E1_joule": energi_L_joule,
    "E1_ev": energi_L_ev
})

print("\nSimulasi pengaruh panjang kotak terhadap energi keadaan dasar:")
print(tabel_panjang)

tabel_panjang.to_csv(
    DATA_DIR / "simulasi_panjang_kotak.csv",
    index=False
)

# =====
# 11. Grafik pengaruh panjang kotak terhadap energi

```

```
# =====

plt.figure(figsize=(7, 5))
plt.plot(tabel_panjang["L_nm"], tabel_panjang["E1_ev"], marker="o")
plt.xlabel("Panjang kotak L (nm)")
plt.ylabel("Energi keadaan dasar E1 (eV)")
plt.title("Pengaruh Panjang Kotak terhadap Energi E1")
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.savefig(
    GAMBAR_DIR / "grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png",
    dpi=300,
    bbox_inches="tight"
)
plt.show()

# =====
# 12. Kesimpulan numerik
# =====

print("\nKesimpulan numerik:")
print(f"Untuk L = {L * 1e9:.2f} nm, energi keadaan dasar E1 = {energi_ev[0]:.6f} eV.")
print(f"Rasio E2/E1 = {energi_joule[1] / energi_joule[0]:.1f}.")
print(f"Rasio E3/E1 = {energi_joule[2] / energi_joule[0]:.1f}.")
print("Energi meningkat sebanding dengan n2.")
print("Energi keadaan dasar menurun ketika panjang kotak L diperbesar.")
```

Kode tersebut adalah bentuk dasar yang dapat langsung dijalankan. Jika mahasiswa menggunakan terminal, jalankan dari folder utama praktikum dengan perintah:

```
python python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Jika menggunakan VS Code, buka folder `praktikum_01_partikel_dalam_kotak/`, lalu jalankan file `.py` dari terminal terintegrasi. Jika struktur folder benar, kode akan membuat file CSV di folder `data/` dan grafik di folder `gambar/`.

6. Penjelasan Bagian Kode

Kode di atas dibagi menjadi dua belas bagian. Pembagian ini mengikuti struktur kode praktikum pada Bab 3.

Bagian pertama mendefinisikan folder kerja. Penggunaan `pathlib` membuat kode lebih rapi dan lebih portabel. Mahasiswa tidak perlu menulis jalur absolut seperti `C:/Users/...`, karena jalur relatif sudah cukup. Ini penting agar kode dapat dijalankan di komputer lain.

Bagian kedua mendefinisikan konstanta. Konstanta Planck, massa elektron, dan faktor konversi joule ke elektronvolt ditulis eksplisit. Penulisan satuan dalam komentar sangat penting karena energi dihitung dalam joule lalu dikonversi ke eV. Tanpa catatan satuan, mahasiswa dapat salah menafsirkan angka energi.

Bagian ketiga mendefinisikan fungsi. Fungsi `energi_partikel_kotak()` memuat rumus E_n . Fungsi `psi_n()` memuat rumus $\psi_n(x)$. Dengan fungsi ini, kode menjadi modular. Jika mahasiswa ingin mengganti massa partikel atau panjang kotak, fungsi tidak perlu ditulis ulang.

Bagian keempat berisi input data. Panjang kotak awal ditetapkan 1 nm. Nilai n dibuat dari 1 sampai 5. Grid posisi x dibuat dari 0 sampai L sebanyak 1000 titik. Grid yang rapat membuat grafik halus.

Bagian kelima menghitung energi E_n . Energi dihitung dalam joule dan eV. Rasio E_n terhadap E_1 juga dihitung. Rasio ini penting karena secara teori $E_n/E_1 = n^2$. Jika tabel menghasilkan rasio 1, 4, 9, 16, dan 25, maka kode sesuai teori.

Bagian keenam menampilkan dan menyimpan tabel energi. Tabel energi wajib menjadi output praktikum. File CSV dapat dibuka dengan spreadsheet atau dibaca kembali dengan Python.

Bagian ketujuh membuat grafik fungsi gelombang $\psi_n(x)$. Grafik ini menunjukkan bentuk gelombang untuk $n = 1$ sampai 5. Mahasiswa harus mengamati bahwa jumlah simpul bertambah seiring kenaikan n .

Bagian kedelapan membuat grafik rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$. Grafik ini selalu tidak negatif. Mahasiswa harus membandingkannya dengan grafik ψ . Nilai ψ negatif menjadi positif setelah dikuadratkan, tetapi titik simpul tetap nol.

Bagian kesembilan membuat grafik energi terhadap n . Grafik ini menunjukkan bahwa energi meningkat tidak linear, tetapi mengikuti n^2 .

Bagian kesepuluh menyimulasikan perubahan panjang kotak. Nilai L diubah dari 0,5 nm sampai 2,0 nm. Energi keadaan dasar dihitung untuk setiap panjang.

Bagian kesebelas membuat grafik pengaruh L terhadap E_1 . Grafik ini menunjukkan bahwa energi turun ketika L membesar. Hubungan ini sesuai dengan $E \propto 1/L^2$.

Bagian kedua belas menampilkan kesimpulan numerik. Kesimpulan tidak hanya menyatakan “kode berhasil”, tetapi menampilkan E_1 , rasio E_2/E_1 , rasio E_3/E_1 , dan hubungan umum energi dengan n serta L .

7. Perhitungan Energi E_n

Perhitungan energi E_n adalah komponen pertama yang wajib ada. Rumus yang digunakan adalah:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

Dalam kode, n dapat berupa array. Jika `n_values = np.arange(1, 6)`, maka Python menghitung energi untuk $n = 1, 2, 3, 4$, dan 5 sekaligus. Inilah keunggulan NumPy. Mahasiswa tidak perlu menulis perhitungan lima kali.

Tabel energi yang dihasilkan berisi:

```

n
energi_joule
energi_ev
rasio_E_n_terhadap_E_1

```

Kolom rasio penting untuk validasi. Untuk model partikel dalam kotak, rasio teoritis adalah:

n	E_n/E_1
1	1
2	4
3	9
4	16
5	25

Jika hasil kode tidak mengikuti pola ini, kemungkinan ada kesalahan pada rumus atau input. Rujukan kimia kuantum juga menunjukkan bahwa selisih energi transisi antar tingkat bergantung pada n , dan untuk transisi n ke $n+1$ berlaku $\Delta E = (2n+1)h^2/(8mL^2)$. Ini menunjukkan bahwa energi tingkat tidak berjarak sama, melainkan makin renggang ketika n bertambah.

Energi ditampilkan dalam joule dan elektronvolt. Joule adalah satuan SI, tetapi untuk partikel mikroskopik nilainya sangat kecil. Elektronvolt sering lebih mudah dibaca dalam konteks energi partikel dan transisi elektronik. Mahasiswa harus memahami bahwa kedua satuan tersebut menyatakan energi yang sama, hanya dalam skala berbeda.

8. Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$

Fungsi gelombang dihitung dengan fungsi:

```

def psi_n(n, x, L):
    return np.sqrt(2 / L) * np.sin(n * np.pi * x / L)

```

Faktor $\text{np.sqrt}(2 / L)$ adalah faktor normalisasi. Fungsi sinus memastikan syarat batas terpenuhi: $\psi(0) = 0$ dan $\psi(L) = 0$. Ketika $x = 0$, $\sin(0) = 0$. Ketika $x = L$, $\sin(n\pi) = 0$ untuk n bilangan bulat. Dengan demikian, fungsi gelombang cocok dengan dinding kotak.

Grafik ψ untuk $n = 1$ sampai 5 harus dianalisis. Mahasiswa harus mencatat:

1. ψ bernilai nol pada $x = 0$ dan $x = L$.
2. ψ dapat bernilai positif dan negatif.
3. $n = 1$ tidak memiliki simpul internal.
4. $n = 2$ memiliki satu simpul internal.
5. $n = 3$ memiliki dua simpul internal.
6. Secara umum, jumlah simpul internal = $n - 1$.

Rujukan kimia kuantum menegaskan bahwa fungsi gelombang bernilai nol pada titik tertentu yang disebut simpul, dan setiap kenaikan satu pada nilai n membuat ψ memiliki satu simpul tambahan. Dengan demikian, grafik ψ bukan hanya gambar, tetapi bukti visual struktur keadaan kuantum.

9. Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$

Rapat probabilitas dihitung dengan:

probabilitas = ψ^2

Karena ψ pada model ini real, ψ^2 sama dengan $|\psi|^2$. Rapat probabilitas tidak pernah negatif. Jika ψ bernilai negatif, ψ^2 tetap positif. Titik simpul tetap bernilai nol karena nol dikuadratkan tetap nol.

Grafik ψ^2 harus dibandingkan dengan grafik ψ . Mahasiswa harus memahami bahwa probabilitas berhubungan dengan ψ^2 , bukan langsung dengan ψ . Ini adalah konsep fundamental mekanika kuantum. Dalam rujukan kimia kuantum, grafik fungsi gelombang dan kerapatan probabilitas partikel dalam kotak ditampilkan sebagai dua hal yang berbeda, dan perbedaan ini penting untuk memahami makna fisik fungsi gelombang.

Analisis yang harus dilakukan mahasiswa:

1. Apakah ψ^2 selalu tidak negatif?
2. Apakah titik simpul pada ψ juga menjadi titik nol pada ψ^2 ?
3. Untuk $n = 1$, di mana probabilitas maksimum?
4. Untuk $n = 2$, mengapa probabilitas di tengah kotak nol?
5. Bagaimana bentuk ψ^2 berubah ketika n meningkat?

Pertanyaan-pertanyaan tersebut membantu mahasiswa menghindari kesalahpahaman klasik. Dalam keadaan $n = 2$, pusat kotak adalah simpul. Ini tidak berarti partikel bergerak melalui pusat tetapi tidak terdeteksi. Ini menunjukkan bahwa deskripsi kuantum bukan lintasan klasik. Rujukan kimia kuantum menegaskan bahwa paradoks seperti probabilitas nol di pusat kotak untuk $n = 2$ muncul karena kita mencoba memahami partikel mikroskopik dengan pengalaman makroskopik klasik.

10. Grafik untuk $n = 1$ sampai 5

Grafik untuk $n = 1$ sampai 5 adalah output visual utama. Ada tiga grafik wajib:

1. Grafik $\psi_n(x)$ untuk $n = 1$ sampai 5.
2. Grafik $\psi_n^2(x)$ untuk $n = 1$ sampai 5.
3. Grafik energi E_n terhadap n .

Grafik ψ menunjukkan bentuk fungsi gelombang. Grafik ψ^2 menunjukkan distribusi probabilitas. Grafik energi terhadap n menunjukkan kuantisasi energi dan hubungan kuadratik. Ketiga grafik ini saling melengkapi. Jika hanya membuat grafik energi, mahasiswa tidak melihat fungsi gelombang. Jika hanya membuat grafik ψ , mahasiswa belum melihat probabilitas. Jika hanya membuat grafik ψ^2 , mahasiswa kehilangan informasi fase atau tanda fungsi gelombang. Karena itu, ketiga grafik harus dibuat dan dianalisis bersama.

Grafik harus memenuhi standar ilmiah:

- Memiliki judul.
- Memiliki label sumbu.
- Memiliki satuan x dalam nm.
- Memiliki legenda untuk nilai n .
- Memiliki resolusi cukup.
- Disimpan ke folder `gambar/`.

File grafik yang dihasilkan kode adalah:

```
gambar/grafik_fungsi_gelombang_psi.png
gambar/grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png
gambar/grafik_energi_terhadap_n.png
gambar/grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png
```

Nama file harus jelas agar mudah dimasukkan ke laporan.

11. Tabel Energi dalam Joule dan Elektronvolt

Tabel energi menjadi output numerik utama. File CSV yang dihasilkan adalah:

```
data/energi_partikel_dalam_kotak.csv
```

Kolom tabel adalah:

```
n
energi_joule
energi_ev
rasio_E_n_terhadap_E_1
```

Tabel ini harus dimasukkan ke laporan atau diringkas dalam laporan. Mahasiswa harus membaca tabel, bukan hanya membuatnya. Analisis minimal:

1. Energi $n = 1$ adalah energi terendah.
2. Energi $n = 2$ empat kali energi $n = 1$.
3. Energi $n = 3$ sembilan kali energi $n = 1$.
4. Energi bertambah cepat ketika n meningkat.
5. Energi dalam joule sangat kecil, sedangkan dalam eV lebih mudah dibaca untuk skala mikroskopik.

Tabel energi juga dapat dibandingkan dengan spreadsheet. Jika spreadsheet menghasilkan nilai yang sama, mahasiswa memperoleh validasi silang. Jika berbeda, mahasiswa harus memeriksa rumus, satuan panjang kotak, massa partikel, atau faktor konversi.

12. Simulasi Perubahan Panjang Kotak

Simulasi perubahan panjang kotak adalah bagian penting dari praktikum. Dalam kode, panjang kotak diubah:

```
L_values_nm = np.array([0.5, 0.75, 1.0, 1.5, 2.0])
L_values_meter = L_values_nm * 1e-9
```

Energi keadaan dasar dihitung untuk setiap L:

```
energi_L_joule = energi_partikel_kotak(1, L_values_meter, m_e)
energi_L_ev = energi_L_joule * joule_to_ev
```

Hasil disimpan sebagai:

```
data/simulasi_panjang_kotak.csv
```

Grafik disimpan sebagai:

```
gambar/grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png
```

Simulasi ini menunjukkan hubungan:

$$E_1 \propto 1/L^2$$

Jika L menjadi dua kali lebih besar, energi menjadi seperempat. Jika L menjadi setengah, energi menjadi empat kali lebih besar. Hubungan ini harus dijelaskan dalam laporan. Mahasiswa tidak cukup menulis “energi berubah”; mereka harus menulis arah perubahan dan alasan matematisnya.

Secara kimia, simulasi ini menjadi jembatan menuju elektron π . Panjang sistem konjugasi yang lebih besar dapat dianalogikan dengan kotak yang lebih panjang. Semakin panjang kotak, jarak energi antar tingkat lebih kecil. Dalam model kualitatif, ini membantu memahami mengapa sistem konjugasi lebih panjang dapat menyerap cahaya berenergi lebih rendah. Rujukan kimia kuantum yang digunakan dalam buku ini menunjukkan bahwa model partikel dalam kotak dapat dipakai untuk pendekatan sederhana pada sistem seperti butadiena, termasuk estimasi panjang gelombang transisi dalam model tersebut.

13. Validasi Hasil Kode

Setelah kode dijalankan, mahasiswa wajib melakukan validasi. Validasi bukan tambahan opsional. Validasi adalah bagian dari praktikum ilmiah.

Validasi pertama: n harus dimulai dari 1. Jika $n = 0$ muncul sebagai keadaan energi, kode atau analisis salah secara konsep.

Validasi kedua: rasio energi harus mengikuti n^2 . Tabel harus menunjukkan $E_2/E_1 = 4$, $E_3/E_1 = 9$, $E_4/E_1 = 16$, dan $E_5/E_1 = 25$.

Validasi ketiga: fungsi gelombang harus bernilai nol di $x = 0$ dan $x = L$. Jika grafik tidak nol di batas, kemungkinan grid, rumus, atau skala salah.

Validasi keempat: ψ^2 tidak boleh negatif. Jika grafik ψ^2 negatif, ada kesalahan perhitungan atau visualisasi.

Validasi kelima: jumlah simpul internal harus $n - 1$. Jika grafik $n = 4$ tidak menunjukkan tiga simpul internal, periksa rumus fungsi gelombang.

Validasi keenam: energi harus turun ketika L diperbesar. Jika energi naik ketika L diperbesar, rumus atau satuan L mungkin salah.

Validasi dapat ditambahkan ke kode dengan pernyataan sederhana:

```
print("\nValidasi rasio energi:")
for n, rasio in zip(n_values, tabel_energi["rasio_E_n_terhadap_E_1"]):
    print(f"n = {n}, rasio E_n/E_1 = {rasio:.1f}, nilai teoritis = {n2}")
```

Kode ini membantu mahasiswa memeriksa langsung kesesuaian hasil dengan teori.

14. Analisis Kritis terhadap Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki banyak keunggulan. Pertama, mahasiswa belajar mengontrol kode dari awal sampai akhir. Kedua, mahasiswa memperoleh keterampilan praktis yang akan digunakan dalam praktikum berikutnya. Ketiga, hasil lebih reproduibel karena kode, data, dan gambar dapat disimpan. Keempat, mahasiswa dapat memodifikasi parameter dengan mudah. Kelima, mahasiswa belajar debugging dan validasi.

Namun, jalur ini juga memiliki tantangan. Pertama, mahasiswa harus memastikan Python dan pakatnya terpasang. Kedua, kesalahan kecil dalam kode dapat menyebabkan hasil salah. Ketiga, jalur file dapat membingungkan jika struktur folder tidak benar. Keempat, mahasiswa dapat menyalin kode tanpa memahami. Kelima, grafik yang tampak bagus dapat menutupi kesalahan konsep jika tidak dianalisis.

Karena itu, dosen perlu menekankan bahwa keberhasilan jalur Python mandiri tidak diukur hanya dari “kode berjalan”. Kode yang berjalan belum tentu benar. Kode dinilai benar jika:

1. Rumus sesuai teori.
2. Satuan benar.
3. Grafik sesuai syarat batas.
4. Tabel energi mengikuti n^2 .
5. Simulasi L mengikuti $1/L^2$.
6. Output tersimpan.
7. Mahasiswa mampu menjelaskan hasil.

Dengan standar tersebut, Python menjadi alat ilmiah, bukan sekadar alat teknis.

15. Kesalahan Umum pada Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum yang sering terjadi:

1. Menggunakan $n = 0$.
2. Menggunakan $L = 1$ tanpa menjelaskan satuan.
3. Menganggap $L = 1$ berarti 1 nm padahal kode memperlakukannya sebagai 1 meter.
4. Lupa mengonversi joule ke eV.
5. Menulis `np.sin(n * np.pi * L / x)` bukan `np.sin(n * np.pi * x / L)`.
6. Tidak memberi label sumbu grafik.
7. Tidak menyimpan CSV.
8. Tidak menyimpan grafik.
9. Menjalankan kode dari folder yang salah.
10. Membuat grafik ψ tetapi tidak membuat grafik ψ^2 .
11. Menganggap ψ negatif berarti probabilitas negatif.
12. Tidak menganalisis simpul.

Kesalahan satuan adalah yang paling berbahaya. Jika L ditulis 1, Python menafsirkannya sebagai 1 meter, bukan 1 nm. Energi menjadi sangat kecil dan tidak sesuai konteks. Karena itu, tulislah:

```
L = 1.0e-9 # 1 nm dalam meter
```

bukan:

```
L = 1
```

Penulisan satuan dalam komentar dan nama variabel sangat penting.

16. Modifikasi Wajib untuk Mahasiswa

Agar mahasiswa tidak hanya menjalankan kode contoh, dosen dapat memberi modifikasi wajib. Misalnya:

1. Ubah panjang kotak menjadi 0,8 nm dan 1,2 nm, lalu bandingkan energi E_1 .
2. Tambahkan grafik ψ untuk $n = 6$.
3. Buat tabel jumlah simpul untuk $n = 1$ sampai 6.
4. Hitung rasio E_n/E_1 untuk $n = 1$ sampai 10.
5. Bandingkan energi keadaan dasar elektron dan proton dalam kotak yang sama.
6. Buat grafik E_1 terhadap L untuk 10 nilai panjang kotak.
7. Jelaskan perubahan grafik ψ^2 ketika n meningkat.

Contoh tambahan kode untuk tabel simpul:

```
tabel_simpul = pd.DataFrame({
    "n": n_values,
    "jumlah_simpul_internal": n_values - 1
})

print(tabel_simpul)

tabel_simpul.to_csv(
    DATA_DIR / "jumlah_simpul_internal.csv",
```

```
        index=False
    )
```

Tabel ini membantu mahasiswa menghubungkan grafik dengan konsep simpul.

Contoh tambahan untuk membandingkan massa elektron dan proton:

```
m_p = 1.67262192369e-27 # massa proton, kg

E1_elektron_ev = energi_partikel_kotak(1, L, m_e) * joule_to_ev
E1_proton_ev = energi_partikel_kotak(1, L, m_p) * joule_to_ev

print(f"E1 elektron = {E1_elektron_ev:.6f} eV")
print(f"E1 proton   = {E1_proton_ev:.6f} eV")
```

Dari hasil ini, mahasiswa dapat melihat bahwa massa lebih besar menghasilkan energi kuantum lebih kecil untuk panjang kotak yang sama. Ini sesuai dengan persamaan $E \propto 1/m$.

17. Keterkaitan dengan Elektron π

Jalur Python mandiri juga dapat diperluas untuk mengaitkan model dengan elektron π . Misalnya, mahasiswa dapat menganggap panjang kotak L sebagai panjang sistem konjugasi. Jika panjang sistem bertambah, energi keadaan menurun dan jarak antar tingkat menjadi lebih kecil. Dengan sedikit modifikasi, mahasiswa dapat menghitung energi transisi sederhana antara tingkat tertentu.

Contoh konseptual:

```
def delta_E_transisi(n_awal, n_akhir, L, m):
    E_awal = energi_partikel_kotak(n_awal, L, m)
    E_akhir = energi_partikel_kotak(n_akhir, L, m)
    return E_akhir - E_awal

c = 2.99792458e8 # m/s

delta_E = delta_E_transisi(1, 2, L, m_e)
lambda_meter = (h * c) / delta_E
lambda_nm = lambda_meter * 1e9

print(f"Panjang gelombang transisi n=1 ke n=2 = {lambda_nm:.2f} nm")
```

Kode ini dapat membantu mahasiswa menghubungkan energi kuantum dengan panjang gelombang cahaya. Namun, dosen harus menekankan bahwa ini masih model sangat sederhana. Molekul nyata memerlukan model yang lebih lengkap. Model partikel dalam kotak hanya memberi intuisi awal tentang hubungan antara panjang delokalisasi dan energi transisi.

18. Output yang Harus Diperoleh dari Jalur Python Mandiri

Setelah kode dijalankan, mahasiswa harus memperoleh output minimal berikut:

File data:

data/energi_partikel_dalam_kotak.csv
data/simulasi_panjang_kotak.csv

File gambar:

gambar/grafik_fungsi_gelombang_psi.png
gambar/grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png
gambar/grafik_energi_terhadap_n.png
gambar/grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png

File kode:

python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py

Laporan:

laporan/laporan_praktikum_01_partikel_dalam_kotak.docx

Output tersebut harus diperiksa sebelum laporan dikumpulkan. Jika salah satu grafik tidak ada, laporan belum lengkap. Jika CSV tidak ada, hasil numerik tidak dapat ditelusuri. Jika kode tidak ada, hasil tidak reproduibel.

19. Format Analisis dalam Laporan

Dalam laporan, mahasiswa dapat menulis analisis dengan struktur berikut:

1. **Analisis kuantisasi energi**
Jelaskan bahwa energi hanya muncul untuk $n = 1, 2, 3$, dan seterusnya. Tunjukkan rasio $E_n/E_1 = n^2$.
2. **Analisis fungsi gelombang**
Jelaskan bentuk ψ untuk $n = 1$ sampai 5. Sebutkan jumlah simpul.
3. **Analisis rapat probabilitas**
Jelaskan perbedaan ψ dan ψ^2 . Terangkan mengapa ψ^2 tidak negatif.
4. **Analisis panjang kotak**
Jelaskan bahwa energi turun ketika L meningkat karena $E \propto 1/L^2$.
5. **Analisis kimia**
Hubungkan model dengan elektron π dalam sistem terkonjugasi secara kualitatif.
6. **Analisis keterbatasan model**
Jelaskan bahwa partikel dalam kotak bukan model sempurna molekul nyata.

Contoh kalimat analisis:

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa rasio E_2/E_1 , E_3/E_1 , E_4/E_1 , dan E_5/E_1 masing-masing mendekati 4, 9, 16, dan 25. Hal ini sesuai dengan persamaan $E_n \propto n^2$. Grafik fungsi gelombang memperlihatkan bahwa jumlah simpul internal bertambah seiring kenaikan n , yaitu $n - 1$. Grafik rapat probabilitas menunjukkan bahwa ψ^2 selalu bernilai tidak negatif dan bernilai nol pada titik simpul. Simulasi perubahan panjang kotak menunjukkan bahwa energi keadaan dasar menurun ketika L diperbesar, sesuai hubungan $E_1 \propto 1/L^2$.

Kalimat tersebut menunjukkan hubungan antara data, grafik, dan teori. Ini lebih baik daripada hanya menulis “hasil sesuai teori” tanpa penjelasan.

20. Implikasi Pembelajaran Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki implikasi pembelajaran yang besar. Mahasiswa belajar bahwa konsep kuantum dapat dihitung dan divisualisasikan dengan kode sederhana. Mereka belajar bahwa rumus bukan hanya objek hafalan, tetapi dapat dijalankan. Mereka belajar bahwa grafik bukan hiasan, tetapi representasi data. Mereka belajar bahwa satuan harus jelas. Mereka belajar bahwa hasil harus diekspor. Mereka belajar bahwa kode harus dapat dijalankan ulang.

Implikasi paling penting adalah terbentuknya **literasi komputasi kuantum dasar**. Mahasiswa mulai memahami bagaimana model matematis berubah menjadi kode, bagaimana kode menghasilkan data, bagaimana data menjadi grafik, dan bagaimana grafik menjadi analisis kimia. Literasi ini akan dipakai kembali ketika mahasiswa menganalisis output optimasi geometri, Hartree–Fock, DFT, frekuensi IR, dan energi reaksi.

Selain itu, jalur Python mandiri memberi mahasiswa rasa kepemilikan terhadap hasil. Mereka tidak hanya menerima grafik dari dosen atau software, tetapi membuatnya sendiri. Mereka dapat mengubah L , n , massa partikel, jumlah titik grid, dan rentang grafik. Dengan perubahan tersebut, mahasiswa dapat bereksperimen secara aman dan cepat. Eksperimen komputasi ini memperkuat pembelajaran aktif.

21. Sintesis Subbab

Jalur Python mandiri adalah inti operasional Praktikum 1. Melalui jalur ini, mahasiswa menulis dan menjalankan file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` untuk menghitung energi E_n , fungsi gelombang $\psi_n(x)$, rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$, grafik $n = 1$ sampai 5, tabel energi dalam joule dan elektronvolt, serta simulasi perubahan panjang kotak. Jalur ini memperkuat pemahaman kuantisasi energi, simpul, probabilitas, pengaruh panjang kotak, dan keterkaitan awal dengan elektron π .

Kekuatan jalur Python mandiri terletak pada transparansi dan reproduibilitas. Setiap angka berasal dari rumus yang terlihat. Setiap grafik berasal dari data yang dapat diperiksa. Setiap output disimpan dalam folder yang jelas. Setiap kesimpulan dapat ditelusuri kembali ke kode. Dengan demikian, mahasiswa tidak hanya mempelajari partikel dalam kotak, tetapi juga mempelajari cara bekerja sebagai praktikan kimia kuantum yang tertib, kritis, dan bertanggung jawab.

Subbab berikutnya akan menetapkan nama file kode secara khusus. Penetapan nama file penting agar seluruh mahasiswa menggunakan standar yang sama, sehingga pengumpulan, pemeriksaan, dan dokumentasi praktikum menjadi lebih tertib.

4.6 Nama File Kode

Nama file kode untuk Praktikum 1 ditetapkan secara baku sebagai berikut:

`praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`

Penetapan nama file kode bukan sekadar persoalan administratif. Dalam praktikum kimia kuantum berbasis Python, nama file merupakan bagian dari sistem dokumentasi ilmiah. Nama file menunjukkan identitas praktikum, urutan praktikum, topik yang dikerjakan, bahasa pemrograman yang digunakan, serta hubungan file tersebut dengan output yang dihasilkan. Dengan nama file yang seragam, dosen dapat memeriksa pekerjaan mahasiswa secara lebih mudah, mahasiswa dapat mengarsipkan hasil praktikum secara tertib, dan seluruh proses komputasi menjadi lebih reproduisibel.

Dalam konteks praktikum ini, file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` adalah file utama yang memuat kode Python untuk menghitung energi partikel dalam kotak, fungsi gelombang $\psi_n(x)$, rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$, grafik untuk $n = 1$ sampai 5, tabel energi dalam joule dan elektronvolt, serta simulasi perubahan panjang kotak terhadap energi. Dengan demikian, file ini bukan hanya “file program”, tetapi merupakan dokumen prosedural yang merekam bagaimana teori partikel dalam kotak diterjemahkan menjadi perhitungan numerik dan visualisasi ilmiah.

Penetapan nama file ini juga berkaitan langsung dengan prinsip reproduisibilitas. Dalam praktikum komputasi, hasil tidak boleh hanya berupa gambar atau angka akhir. Hasil harus dapat dilacak kembali ke kode, data, parameter, dan output yang digunakan. Rujukan praktikum sebelumnya telah menegaskan bahwa reproduisibilitas membutuhkan input lengkap, versi program, parameter komputasi, dan file output yang dapat diperiksa ulang. Karena itu, nama file kode harus jelas, tetap, dan mudah dihubungkan dengan output praktikum.

1. Makna Nama File `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`

Nama file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` terdiri atas beberapa unsur:

Unsur Nama File	Makna
<code>praktikum</code>	Menunjukkan bahwa file ini adalah file kode praktikum
<code>01</code>	Menunjukkan urutan praktikum pertama
<code>partikel_dalam_kotak</code>	Menunjukkan topik utama praktikum
<code>.py</code>	Menunjukkan bahwa file ditulis dalam bahasa Python

Struktur nama ini dibuat agar informatif. Ketika dosen membuka folder mahasiswa, dosen langsung mengetahui bahwa file tersebut adalah kode untuk Praktikum 1 tentang partikel dalam kotak. Ketika mahasiswa membuka kembali folder beberapa bulan kemudian, mahasiswa juga masih dapat mengenali fungsi file tersebut tanpa harus membuka isinya terlebih dahulu.

Bagian `praktikum` menunjukkan jenis aktivitas. File ini bukan catatan bebas, bukan data mentah, bukan gambar, dan bukan laporan akhir. Ia adalah file kode praktikum. Bagian `01` menunjukkan urutan. Angka dua digit digunakan agar urutan file tetap rapi jika jumlah praktikum bertambah. Misalnya, `praktikum_01`, `praktikum_02`, ..., `praktikum_10` akan tersusun baik secara alfabetis. Bagian `partikel_dalam_kotak` menunjukkan topik. Bagian `.py` menunjukkan bahwa file ini dapat dijalankan sebagai script Python.

Nama file seperti ini lebih baik daripada nama yang terlalu pendek, terlalu umum, atau tidak informatif. Misalnya:

```
kode.py
latihan.py
praktikum.py
partikel.py
coba1.py
final.py
```

Nama-nama tersebut tidak cukup jelas. File `kode.py` tidak menunjukkan praktikum apa. File `latihan.py` tidak menunjukkan topik. File `coba1.py` tidak layak untuk arsip ilmiah karena hanya menunjukkan status sementara. File `final.py` juga berbahaya karena dalam praktiknya sering muncul `final2.py`, `final_baru.py`, atau `final_fix.py`, yang justru membuat arsip kacau. Nama file standar mencegah kekacauan seperti itu.

2. Nama File sebagai Metadata Ilmiah

Metadata adalah informasi tentang data atau dokumen. Dalam praktikum komputasi, metadata dapat berupa nama praktikum, metode, basis set, parameter, software, tanggal, versi kode, atau nama file. Nama file adalah metadata paling awal yang dilihat pembaca. Jika nama file jelas, proses dokumentasi menjadi lebih mudah. Jika nama file kabur, pembaca harus membuka file satu per satu untuk mengetahui isinya.

Pada Praktikum 1, nama file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` mengandung metadata minimal:

```
Jenis kegiatan : praktikum
Urutan        : 01
Topik         : partikel dalam kotak
Bahasa        : Python
```

Metadata ini harus didukung oleh isi file. Di bagian awal file, mahasiswa sebaiknya menulis header komentar seperti berikut:

```
# =====
# PRAKTIKUM 1
# VISUALISASI FUNGSI GELOMBANG DAN PARTIKEL DALAM KOTAK
#
# Nama file:
# praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
#
# Tujuan:
# 1. Menghitung energi partikel dalam kotak satu dimensi.
# 2. Memvisualisasikan fungsi gelombang  $\psi_n(x)$ .
# 3. Memvisualisasikan rapat probabilitas  $\psi_n^2(x)$ .
# 4. Menunjukkan hubungan bilangan kuantum  $n$  dengan energi.
# 5. Menunjukkan pengaruh panjang kotak  $L$  terhadap energi.
# =====
```

Header ini membuat file lebih mudah dibaca. Ketika dosen atau mahasiswa lain membuka file, identitas praktikum langsung terlihat. Header juga membantu jika file dikirim terpisah dari foldernya. Walaupun nama file sudah jelas, isi file tetap perlu mencantumkan identitas karena file dapat berpindah, diganti nama, atau disalin ke tempat lain.

3. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` menggunakan huruf kecil dan garis bawah. Pola ini dipilih karena aman, mudah dibaca, dan umum digunakan dalam penulisan file Python. Garis bawah menggantikan spasi agar file lebih mudah dijalankan di terminal dan lebih aman lintas sistem operasi. Nama file dengan spasi dapat dijalankan, tetapi sering menimbulkan masalah saat dipanggil melalui terminal, script, atau sistem otomatis.

Contoh nama file yang tidak disarankan:

```
Praktikum 01 Partikel Dalam Kotak.py
Praktikum-01-Partikel-Dalam-Kotak.py
PRAKTIKUM_01_PARTIKEL_DALAM_KOTAK.py
praktikum 01 partikel dalam kotak.py
praktikum_01_partikel_dalam_kotak FINAL.py
```

Masalah dari nama-nama tersebut berbeda-beda. Spasi dapat menyulitkan pemanggilan dari terminal. Huruf kapital berlebihan dapat membuat nama tidak konsisten. Tanda hubung - tidak ideal jika file ingin diperlakukan sebagai modul Python, karena tanda hubung tidak dapat digunakan dalam nama modul impor standar. Kata `FINAL` menunjukkan kebiasaan versi manual yang rawan membingungkan. Oleh karena itu, bentuk paling aman adalah:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Nama ini mudah dibaca manusia dan relatif aman untuk sistem komputer.

4. Posisi File dalam Struktur Folder Praktikum

File kode utama harus ditempatkan pada folder `python/`:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── input/
├── output/
├── python/
│   └── praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├── gambar/
├── laporan/
└── data/
```

Penempatan ini penting karena folder praktikum memiliki fungsi masing-masing. Folder `python/` berisi kode. Folder `data/` berisi CSV hasil perhitungan. Folder `gambar/` berisi grafik. Folder `laporan/` berisi laporan akhir. Folder `output/` dapat berisi log eksekusi atau output tambahan. Folder `input/` dapat berisi catatan parameter awal.

Jika file kode diletakkan sembarangan, misalnya langsung di folder utama, di folder `data/`, atau bercampur dengan gambar, maka struktur praktikum menjadi kurang tertib. Pada praktikum pertama mungkin belum terasa berat, tetapi pada praktikum berikutnya jumlah file akan bertambah. Jika sejak awal file tidak ditata, mahasiswa akan kesulitan menemukan kode, data, dan output.

Posisi file dalam folder juga memengaruhi jalur relatif dalam kode. Jika file `.py` berada di folder `python/`, kode dapat menggunakan struktur berikut:

```
from pathlib import Path

BASE_DIR = Path(__file__).resolve().parent.parent

DATA_DIR = BASE_DIR / "data"
GAMBAR_DIR = BASE_DIR / "gambar"
OUTPUT_DIR = BASE_DIR / "output"
```

Dengan struktur ini, file kode dapat menyimpan data ke folder `data/` dan grafik ke folder `gambar/` meskipun file `.py` berada di folder `python/`. Ini membuat kode lebih portabel dan tidak bergantung pada jalur absolut komputer tertentu.

5. Nama File dan Reprodusibilitas

Reprodusibilitas berarti hasil dapat diperoleh kembali dengan prosedur yang sama. Dalam praktikum kimia kuantum, reprodusibilitas tidak hanya bergantung pada rumus yang benar, tetapi juga pada ketersediaan file kode yang tepat. Jika laporan menyebutkan bahwa grafik dibuat dengan Python, tetapi file kodenya tidak jelas atau tidak disertakan, maka hasil sulit diverifikasi.

File `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` harus menjadi rujukan utama bagi semua output berikut:

```
data/energi_partikel_dalam_kotak.csv
data/simulasi_panjang_kotak.csv
gambar/grafik_fungsi_gelombang_psi.png
gambar/grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png
gambar/grafik_energi_terhadap_n.png
gambar/grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png
```

Dengan demikian, ketika dosen melihat grafik fungsi gelombang dalam laporan, dosen dapat membuka file kode untuk memeriksa bagaimana grafik dibuat. Ketika dosen melihat tabel energi, dosen dapat memeriksa rumus energi dalam kode. Ketika mahasiswa menyatakan bahwa $E_2/E_1 = 4$, dosen dapat melihat kolom rasio dalam CSV dan kode yang menghasilkan rasio tersebut.

Rujukan praktikum sebelumnya menegaskan bahwa data wajib dalam praktikum meliputi struktur awal, metode atau basis, kriteria konvergensi, output, dan interpretasi; selain itu, reprodusibilitas membutuhkan input lengkap, versi program, parameter komputasi, dan file output. Pada Praktikum 1, tidak ada metode basis set atau output molekul seperti pada perhitungan DFT, tetapi prinsipnya tetap sama: parameter model, kode, tabel hasil, grafik, dan interpretasi harus tersedia.

6. Nama File dalam Hubungan dengan Notebook

Jika mahasiswa menggunakan Jupyter Notebook, nama notebook yang disarankan adalah:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb
```

Namun, file `.py` tetap menjadi nama file kode standar dalam subbab ini. Notebook boleh digunakan sebagai buku kerja interaktif, sedangkan file `.py` digunakan sebagai script final yang lebih mudah dijalankan ulang. Jika praktikum dilaksanakan melalui Google Colab atau ChemCompute Jupyter, mahasiswa dapat mengunduh notebook sebagai `.ipynb`. Bila memungkinkan, notebook juga diekspor menjadi file `.py`.

Hubungan antara file `.ipynb` dan `.py` dapat ditulis sebagai berikut:

Jenis File	Fungsi
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb	Buku kerja interaktif berisi teks, kode, grafik, dan analisis
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py	Script Python utama yang dapat dijalankan ulang
energi_partikel_dalam_kotak.csv	Tabel energi hasil perhitungan
grafik_fungsi_gelombang_psi.png	Grafik fungsi gelombang
grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png	Grafik rapat probabilitas

Notebook sangat baik untuk pembelajaran karena memuat narasi dan output. Namun, file `.py` lebih ringkas untuk arsip kode. Dalam penilaian praktikum, dosen dapat meminta keduanya, terutama jika kelas sudah cukup siap secara teknis. Jika hanya satu yang dikumpulkan, file `.py` harus tetap diprioritaskan untuk jalur Python mandiri.

7. Versi File dan Larangan Nama Ganda yang Membingungkan

Dalam praktik komputasi, mahasiswa sering membuat banyak versi file. Misalnya:

```
praktikum_01.py
praktikum_01_fix.py
praktikum_01_final.py
praktikum_01_final_baru.py
praktikum_01_revisi_fix.py
```

Pola seperti ini harus dihindari dalam pengumpulan akhir karena membingungkan. Dosen tidak tahu file mana yang benar. Mahasiswa sendiri juga dapat salah menjalankan file lama. Untuk pengumpulan akhir, nama file harus tetap:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Jika mahasiswa ingin menyimpan versi percobaan, gunakan folder khusus, misalnya:

```
python/draft/
```

Contoh:

```
python/
├─ praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├─ draft/
│   └─ praktikum_01_uji_awal.py
│   └─ praktikum_01_variabel_L.py
```

Dengan cara ini, file final tetap jelas. File percobaan tidak mengganggu penilaian. Jika menggunakan sistem versi yang lebih lanjut, mahasiswa dapat menggunakan Git, tetapi untuk praktikum dasar cukup dengan disiplin folder dan nama file.

8. Nama File dan Kemudahan Pemeriksaan Dosen

Standar nama file sangat membantu dosen. Dalam kelas dengan banyak mahasiswa, dosen perlu memeriksa puluhan atau ratusan file. Jika setiap mahasiswa memberi nama berbeda, pemeriksaan menjadi lambat. Dengan nama file standar, dosen dapat langsung mencari file yang sama dalam setiap folder mahasiswa.

Misalnya, dosen dapat meminta struktur pengumpulan:

```
NIM_NamaMahasiswa_praktikum_01/
├─ python/
│   └─ praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├─ data/
├─ gambar/
└─ laporan/
```

Dengan struktur ini, dosen dapat memeriksa:

1. Apakah file kode ada?
2. Apakah nama file benar?
3. Apakah kode dapat dijalankan ulang?
4. Apakah CSV dihasilkan?
5. Apakah grafik tersimpan?
6. Apakah laporan merujuk pada output yang benar?

Nama file standar juga memudahkan penilaian otomatis sederhana. Misalnya, dosen dapat menggunakan script untuk memeriksa apakah file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` ada pada folder `python/`. Jika nama file berbeda-beda, pemeriksaan otomatis sulit dilakukan.

9. Nama File dan Keterbacaan Proyek

Dalam proyek komputasi, keterbacaan tidak hanya berlaku pada isi kode, tetapi juga pada struktur file. Folder yang rapi dan nama file yang jelas membuat proyek dapat dibaca seperti daftar isi. Jika seseorang membuka folder praktikum, ia seharusnya dapat memahami isi proyek tanpa bertanya kepada penulisnya.

Contoh struktur yang baik:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── python/
│   └── praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├── data/
│   ├── energi_partikel_dalam_kotak.csv
│   └── simulasi_panjang_kotak.csv
├── gambar/
│   ├── grafik_fungsi_gelombang_psi.png
│   ├── grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png
│   ├── grafik_energi_terhadap_n.png
│   └── grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_01_partikel_dalam_kotak.docx
```

Dari struktur ini, pembaca langsung mengetahui kode utama, data utama, gambar utama, dan laporan utama. Ini adalah bentuk keterbacaan proyek. Keterbacaan proyek mendukung keterbacaan ilmiah.

Sebaliknya, struktur berikut kurang baik:

```
praktikum/
├── coba.py
├── hasil.csv
├── gambar1.png
├── gambar2.png
├── final.docx
├── baru.py
└── fix.png
```

Struktur tersebut tidak memberi informasi cukup. File `hasil.csv` hasil apa? `gambar1.png` gambar apa? `coba.py` apakah final? `baru.py` apakah menggantikan `coba.py`? Kekacauan nama file menghambat pemeriksaan ilmiah.

10. Nama File dan Isi Minimal yang Harus Ada

File `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` harus memuat isi minimal berikut:

1. Header identitas praktikum.
2. Import pustaka.
3. Definisi folder kerja.
4. Definisi konstanta.
5. Definisi fungsi energi E_n .
6. Definisi fungsi gelombang $\psi_n(x)$.
7. Input nilai n dan panjang kotak L .
8. Perhitungan energi dalam joule dan eV.
9. Tabel energi.
10. Grafik $\psi_n(x)$.
11. Grafik $\psi_n^2(x)$.

12. Grafik energi terhadap n .
13. Simulasi perubahan panjang kotak.
14. Ekspor CSV.
15. Ekspor gambar.
16. Kesimpulan numerik.

Isi minimal ini harus sesuai dengan tujuan praktikum. Pada subbab 4.5 sudah ditunjukkan kode lengkap jalur Python mandiri. Subbab 4.6 ini menegaskan bahwa seluruh kode tersebut harus berada dalam file bernama:

`praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`

Jika file diberi nama benar tetapi isinya tidak lengkap, file belum memenuhi standar. Jika isi lengkap tetapi nama file tidak sesuai, pengarsipan dan pemeriksaan menjadi terganggu. Nama file dan isi file harus sama-sama benar.

11. Contoh Header Metadata dalam File

Agar file lebih rapi, gunakan header metadata seperti berikut:

```
# =====
# PRAKTIKUM 1: PARTIKEL DALAM KOTAK
# =====
#
# Nama file   : praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
# Topik      : Visualisasi fungsi gelombang dan partikel dalam kotak
# Model     : Partikel dalam kotak satu dimensi
# Output     : CSV dan grafik PNG
#
# File output:
# 1. data/energi_partikel_dalam_kotak.csv
# 2. data/simulasi_panjang_kotak.csv
# 3. gambar/grafik_fungsi_gelombang_psi.png
# 4. gambar/grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png
# 5. gambar/grafik_energi_terhadap_n.png
# 6. gambar/grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png
# =====
```

Header ini membuat hubungan antara kode dan output menjadi jelas. Ketika file dibuka, pembaca langsung mengetahui output apa yang seharusnya dihasilkan. Jika salah satu output tidak ada, mahasiswa atau dosen dapat segera memeriksa bagian kode terkait.

Header metadata juga penting untuk dokumentasi jangka panjang. Praktikum ini mungkin dibuka lagi ketika mahasiswa menyusun portofolio, proyek mini, atau skripsi. Header yang baik membuat file tetap bermakna walaupun konteks kelas sudah berlalu.

12. Hubungan Nama File dengan Model Partikel dalam Kotak

Nama `partikel_dalam_kotak` harus dipertahankan karena mencerminkan model teoritis yang digunakan. Model ini bukan sekadar simulasi grafik sinus biasa. Ia adalah model mekanika kuantum dengan syarat batas, fungsi gelombang ternormalisasi, energi diskrit, dan rapat probabilitas. Nama file harus mencerminkan substansi ilmiahnya.

Rujukan kimia kuantum menunjukkan bahwa fungsi gelombang partikel dalam kotak memiliki bentuk sinus ternormalisasi, setiap nilai n menghasilkan fungsi gelombang dan keadaan berbeda, serta jumlah simpul bertambah ketika n meningkat. Dengan demikian, topik `partikel_dalam_kotak` dalam nama file memang merujuk pada model ilmiah yang spesifik, bukan sekadar judul latihan.

Jika file dinamai terlalu umum seperti `grafik_sinus.py`, maka makna kuantumnya hilang. Fungsi gelombang partikel dalam kotak memang berbentuk sinus, tetapi tidak semua grafik sinus adalah fungsi gelombang kuantum. Nama `partikel_dalam_kotak` menjaga konteks teori tetap terlihat.

13. Kesalahan Umum dalam Penamaan File

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari:

Nama File Salah	Masalah
<code>praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py</code>	Mengandung spasi
<code>Praktikum_01_Partikel_Dalam_Kotak.py</code>	Huruf kapital tidak konsisten
<code>praktikum-01-partikel-dalam-kotak.py</code>	Tanda hubung kurang ideal untuk modul Python
<code>praktikum_1.py</code>	Terlalu pendek dan kurang informatif
<code>partikel.py</code>	Tidak menunjukkan urutan praktikum
<code>kode_final.py</code>	Tidak menunjukkan topik
<code>praktikum_01_final_fix.py</code>	Menunjukkan versi tidak tertib
<code>praktikum_01_partikel_dalam_kotak.txt</code>	Ekstensi salah
<code>praktikum_01_partikel_dalam_kotak.docx</code>	Bukan file kode Python
<code>praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb</code>	Boleh sebagai notebook, tetapi bukan file <code>.py</code> utama

Nama yang benar tetap:

`praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`

Jika mahasiswa menggunakan notebook, notebook boleh bernama:

`praktikum_01_partikel_dalam_kotak.ipynb`

Namun, untuk subbab ini, nama file kode Python utama tetap `.py`.

14. Cara Menjalankan File Berdasarkan Nama Standar

Jika struktur folder sudah benar, file dapat dijalankan dari folder utama praktikum dengan perintah:

```
python python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Perintah tersebut berarti: gunakan Python untuk menjalankan file yang ada di folder `python/`. Jika kode berjalan dengan benar, folder `data/` dan `gambar/` akan berisi output.

Jika menggunakan Windows PowerShell, mahasiswa dapat menjalankan:

```
python .\python\praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Jika menggunakan Linux atau macOS, mahasiswa dapat menjalankan:

```
python python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Jika menggunakan environment tertentu, pastikan environment aktif sebelum menjalankan kode. Jika menggunakan Anaconda, aktifkan environment terlebih dahulu:

```
conda activate kimia-kuantum
python python/praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

Jika menggunakan VS Code, buka folder utama praktikum, bukan hanya file `.py`. Ini penting agar jalur relatif bekerja dengan benar.

15. Nama File dalam Laporan Praktikum

Dalam laporan praktikum, mahasiswa harus menyebutkan nama file kode. Contoh penulisan bagian metode:

Perhitungan dilakukan menggunakan Python melalui file kode ``praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py``. File tersebut memuat perhitungan energi E_n , fungsi gelombang $\psi_n(x)$, rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$, grafik untuk $n = 1$ sampai 5, tabel energi dalam joule dan elektronvolt, serta simulasi perubahan panjang kotak L terhadap energi. Output kode disimpan dalam folder ``data/`` dan ``gambar/``.

Penyebutan nama file di laporan membuat hubungan antara laporan dan kode menjadi jelas. Dosen tidak perlu menebak file mana yang dipakai. Jika ada revisi, mahasiswa dapat menunjukkan bahwa laporan merujuk pada file final yang benar.

16. Nama File dan Integritas Akademik

Nama file juga berkaitan dengan integritas akademik. File yang diberi nama jelas menunjukkan tanggung jawab penulis terhadap pekerjaannya. File yang kacau, tidak jelas, atau berubah-ubah dapat menyulitkan pemeriksaan dan membuka ruang kesalahan. Dalam praktikum komputasi, integritas tidak hanya berarti tidak menyalin pekerjaan orang lain, tetapi juga menyajikan proses komputasi secara jelas.

Mahasiswa harus memastikan bahwa file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` adalah file yang benar-benar digunakan untuk menghasilkan data dan grafik dalam laporan. Tidak boleh ada perbedaan antara file yang dikumpulkan dan file yang digunakan. Jika grafik dibuat dari file lain tetapi file yang dikumpulkan berbeda, maka laporan tidak reproduisibel. Jika mahasiswa mengubah grafik secara manual tanpa mencatatnya, maka integritas data terganggu.

File kode adalah bukti proses. Karena itu, file kode harus diperlakukan sebagai bagian dari dokumen ilmiah.

17. Analisis Kritis terhadap Standarisasi Nama File

Standarisasi nama file memiliki kelebihan dan keterbatasan. Kelebihannya jelas: pengarsipan lebih tertib, pemeriksaan lebih mudah, output lebih mudah ditelusuri, dan mahasiswa belajar disiplin komputasi. Namun, standarisasi juga dapat menjadi mekanis jika mahasiswa hanya mematuhi nama tanpa memahami isi. Karena itu, nama file standar harus disertai standar isi dan standar output.

Mahasiswa tidak boleh berpikir bahwa file sudah benar hanya karena namanya benar. Nama file adalah pintu masuk. Isi file tetap harus benar. Kode harus dapat dijalankan. Rumus harus tepat. Grafik harus sesuai teori. Data harus diekspor. Analisis harus ditulis. Jika nama file benar tetapi kode gagal berjalan, praktikum belum selesai. Jika kode berjalan tetapi tidak menghasilkan output yang diwajibkan, file belum memenuhi tujuan.

Sebaliknya, jika mahasiswa membuat kode yang benar tetapi menamainya sembarangan, pekerjaan menjadi sulit diperiksa dan diarsipkan. Dalam sains komputasional, keteraturan teknis adalah bagian dari kualitas akademik. Standarisasi nama file membantu membentuk kebiasaan tersebut.

18. Implikasi untuk Praktikum Berikutnya

Penetapan nama file pada Praktikum 1 menjadi pola untuk praktikum berikutnya. Jika Praktikum 1 menggunakan:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
```

maka praktikum berikutnya dapat mengikuti pola yang sama:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
praktikum_06_spektrum_ir.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Pola ini membuat seluruh buku praktikum memiliki konsistensi. Mahasiswa dapat melihat urutan praktikum hanya dari nama file. Dosen dapat mengelola pengumpulan tugas dengan lebih mudah.

Pada Bab 11, ketika otomasi laporan dibahas, nama file standar akan sangat membantu karena script dapat mencari file berdasarkan pola tertentu.

Dengan demikian, subbab 4.6 tidak hanya berlaku untuk Praktikum 1. Ia membentuk budaya penamaan file untuk seluruh rangkaian praktikum kimia kuantum.

19. Checklist Nama File

Sebelum mengumpulkan praktikum, mahasiswa harus memeriksa checklist berikut:

```
[ ] File kode bernama praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
[ ] File berada dalam folder python/
[ ] File dapat dijalankan dari folder utama praktikum
[ ] File memiliki header identitas praktikum
[ ] File memuat perhitungan  $E_n$ 
[ ] File memuat fungsi  $\psi_n(x)$ 
[ ] File memuat rapat probabilitas  $\psi_n^2(x)$ 
[ ] File menghasilkan tabel energi CSV
[ ] File menghasilkan grafik  $\psi$ 
[ ] File menghasilkan grafik  $\psi^2$ 
[ ] File menghasilkan grafik energi terhadap  $n$ 
[ ] File menghasilkan grafik pengaruh panjang kotak
[ ] Nama file tidak mengandung spasi
[ ] Nama file tidak menggunakan kata final/fix/revisi
[ ] Nama file yang disebut dalam laporan sama dengan file yang dikumpulkan
```

Checklist ini sederhana tetapi sangat penting. Banyak masalah praktikum tidak muncul dari teori yang sulit, tetapi dari file yang salah, nama yang membingungkan, atau output yang tidak tersimpan. Checklist membantu mencegah kesalahan tersebut.

20. Sintesis Subbab

Nama file kode untuk Praktikum 1 ditetapkan sebagai `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`. Nama ini memuat identitas praktikum, urutan, topik, dan bahasa pemrograman. Penetapan nama file merupakan bagian dari reproduibilitas, keterbacaan proyek, kemudahan pemeriksaan, dan integritas akademik. File tersebut harus ditempatkan di folder `python/`, memuat kode lengkap praktikum, dan menghasilkan output yang sesuai dengan subbab berikutnya.

Dengan nama file yang baku, seluruh hasil praktikum dapat ditelusuri secara jelas. Tabel energi, grafik fungsi gelombang, grafik rapat probabilitas, grafik energi terhadap n , dan simulasi panjang kotak semuanya harus berasal dari file kode yang sama. Subbab berikutnya akan membahas output kode secara lebih rinci, yaitu jenis tabel, grafik, dan file hasil yang wajib dihasilkan oleh `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`.

4.7 Output Kode

Output kode adalah seluruh hasil yang dihasilkan oleh file Python `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` setelah kode dijalankan secara benar. Dalam praktikum kimia kuantum, output kode tidak boleh dipahami hanya sebagai angka yang muncul di layar. Output kode mencakup tabel, grafik, file data, file gambar, dan ringkasan numerik yang dapat digunakan untuk menyusun laporan praktikum. Dengan kata lain, output kode adalah bukti komputasional bahwa teori telah diterjemahkan menjadi perhitungan, visualisasi, dan data yang dapat diperiksa ulang.

Dalam Praktikum 1, output kode wajib meliputi:

1. **Tabel energi.**
2. **Grafik ψ .**
3. **Grafik ψ^2 .**
4. **Grafik energi terhadap n .**
5. **File CSV hasil perhitungan.**

Kelima output tersebut saling melengkapi. Tabel energi menunjukkan kuantisasi energi secara numerik. Grafik ψ menunjukkan bentuk fungsi gelombang. Grafik ψ^2 menunjukkan rapat probabilitas. Grafik energi terhadap n menunjukkan pola kenaikan energi terhadap bilangan kuantum. File CSV memastikan data numerik tersimpan dan dapat digunakan ulang dalam laporan atau pemeriksaan dosen. Jika salah satu output tidak ada, maka praktikum belum lengkap.

Secara metodologis, output kode berfungsi sebagai jembatan antara **kode** dan **laporan**. Kode menghasilkan data; data disusun menjadi tabel; tabel divisualisasikan menjadi grafik; grafik dianalisis menjadi kesimpulan; kesimpulan dimasukkan ke laporan. Dengan demikian, output kode bukan hiasan teknis, tetapi bagian inti dari alur ilmiah praktikum. Dalam standar reproduibilitas komputasi, hasil yang baik harus memiliki jejak yang dapat diperiksa: input, parameter, kode, output, dan interpretasi. Pada Praktikum 1, output kode menjadi bukti bahwa mahasiswa tidak hanya memahami rumus partikel dalam kotak, tetapi juga mampu mengolah rumus tersebut menjadi data ilmiah.

1. Kedudukan Output dalam Praktikum Komputasi

Dalam praktikum laboratorium basah, output dapat berupa perubahan warna, massa endapan, volume titrasi, spektrum, atau nilai absorbansi. Dalam praktikum kimia kuantum berbasis Python, output berupa file digital: tabel, grafik, data, dan ringkasan numerik. Perbedaan bentuk ini tidak mengurangi nilai ilmiahnya. Justru dalam praktikum komputasi, output digital memiliki kelebihan karena dapat disimpan, dijalankan ulang, dibandingkan, dan dianalisis kembali.

Output kode harus memenuhi tiga syarat utama:

1. **Dapat dibaca manusia.**
Tabel harus memiliki kolom jelas. Grafik harus memiliki label sumbu, satuan, dan judul. Ringkasan numerik harus menjelaskan makna angka.

2. Dapat diproses ulang.

Data harus disimpan dalam format terbuka seperti CSV sehingga dapat dibaca oleh Python, spreadsheet, atau software lain.

3. Dapat ditelusuri ke kode.

Setiap grafik dan tabel harus berasal dari file

`praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py`, bukan dibuat manual tanpa jejak.

Kedudukan output sangat penting karena laporan praktikum tidak boleh hanya berisi pernyataan umum seperti “energi meningkat ketika n bertambah.” Laporan harus menunjukkan data dan grafik yang membuktikan pernyataan tersebut. Jika mahasiswa menyatakan bahwa energi meningkat sebanding dengan n^2 , maka tabel energi dan grafik energi terhadap n harus mendukungnya. Jika mahasiswa menyatakan bahwa jumlah simpul internal adalah $n - 1$, maka grafik ψ harus memperlihatkan. Jika mahasiswa menyatakan bahwa ψ^2 selalu tidak negatif, maka grafik rapat probabilitas harus menunjukkan hal tersebut.

2. Output Pertama: Tabel Energi

Output pertama adalah **tabel energi**. Tabel energi memuat hasil perhitungan energi partikel dalam kotak untuk nilai bilangan kuantum $n = 1$ sampai 5. Tabel ini menjadi bukti numerik utama bahwa energi dalam model partikel dalam kotak bersifat terkuantisasi.

Kolom minimal tabel energi adalah:

Kolom	Makna
n	Bilangan kuantum
<code>energi_joule</code>	Energi E_n dalam joule
<code>energi_ev</code>	Energi E_n dalam elektronvolt
<code>rasio_E_n_terhadap_E_1</code>	Rasio E_n terhadap energi keadaan dasar

Kolom n menunjukkan keadaan kuantum. Nilai n harus dimulai dari 1, bukan 0. Kolom `energi_joule` menunjukkan hasil perhitungan dalam satuan SI. Kolom `energi_ev` memudahkan pembacaan energi pada skala mikroskopik. Kolom rasio menunjukkan pola teoritis $E_n/E_1 = n^2$. Kolom rasio ini sangat penting untuk validasi karena tanpa melihat nilai energi absolut pun mahasiswa dapat memeriksa apakah pola kuantisasi sudah benar.

Contoh bentuk tabel energi:

n	<code>energi_joule</code>	<code>energi_ev</code>	<code>rasio_E_n_terhadap_E_1</code>
1	...	...	1
2	...	...	4
3	...	...	9
4	...	...	16
5	...	...	25

Tabel energi harus dianalisis, bukan hanya ditampilkan. Mahasiswa perlu menjelaskan bahwa rasio 1, 4, 9, 16, dan 25 berasal dari hubungan:

$$E_n \propto n^2$$

Artinya, energi keadaan $n = 2$ adalah empat kali energi keadaan dasar, energi keadaan $n = 3$ adalah sembilan kali energi keadaan dasar, dan seterusnya. Hubungan ini menunjukkan bahwa tingkat energi tidak berjarak sama. Semakin tinggi n , kenaikan energi antar keadaan juga makin besar.

Tabel energi juga melatih mahasiswa memahami satuan. Joule sering menghasilkan angka sangat kecil karena energi partikel mikroskopik berada pada skala sangat kecil. Elektronvolt lebih mudah dibaca untuk konteks elektron dan transisi energi. Oleh karena itu, menampilkan dua satuan bukan sekadar formalitas, tetapi bagian dari literasi fisika-kimia.

Dalam laporan, tabel energi dapat ditempatkan pada bagian hasil. Mahasiswa harus menyebutkan bahwa tabel tersebut dihasilkan oleh file `praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py` dan disimpan dalam format CSV. Jika tabel disalin ke laporan, pastikan jumlah angka signifikan tidak berlebihan. Angka energi boleh dibulatkan secara wajar, tetapi file CSV tetap menyimpan nilai numerik lebih lengkap.

3. Output Kedua: Grafik Fungsi Gelombang $\psi_n(x)$

Output kedua adalah **grafik fungsi gelombang $\psi_n(x)$** untuk $n = 1$ sampai 5. Grafik ini memperlihatkan bentuk fungsi gelombang pada setiap tingkat kuantum. Fungsi gelombang partikel dalam kotak satu dimensi ditulis sebagai:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

Grafik ψ memiliki fungsi pedagogis yang sangat penting karena mahasiswa dapat melihat bahwa nilai n mengubah bentuk fungsi gelombang. Untuk $n = 1$, fungsi gelombang memiliki bentuk paling sederhana. Untuk $n = 2$, grafik memiliki satu simpul internal. Untuk $n = 3$, grafik memiliki dua simpul internal. Secara umum, jumlah simpul internal adalah $n - 1$. Dengan demikian, grafik ψ menjadi bukti visual hubungan antara bilangan kuantum dan struktur gelombang.

Grafik ψ harus memenuhi standar minimal berikut:

1. Sumbu x diberi label x (nm).
2. Sumbu y diberi label $\psi_n(x)$.
3. Judul grafik jelas, misalnya Fungsi Gelombang Partikel dalam Kotak.
4. Setiap kurva memiliki legenda $n = 1$ sampai $n = 5$.
5. Grafik disimpan dalam format PNG.
6. Grafik menunjukkan nilai nol pada $x = 0$ dan $x = L$.
7. Grafik cukup jelas untuk dimasukkan dalam laporan.

Nama file grafik yang disarankan:

`gambar/grafik_fungsi_gelombang_psi.png`

Grafik ini harus dianalisis dengan bahasa konseptual. Mahasiswa tidak cukup menulis “grafik ψ berhasil dibuat.” Mahasiswa harus menulis bahwa fungsi gelombang bernilai nol pada batas kotak karena syarat batas. Mahasiswa juga harus menjelaskan bahwa jumlah simpul bertambah ketika n meningkat. Selain itu, mahasiswa harus memahami bahwa nilai negatif pada ψ bukan probabilitas negatif. Tanda positif dan negatif menunjukkan fase fungsi gelombang, sedangkan probabilitas diperoleh dari ψ^2 .

Secara historis dan konseptual, grafik ψ memperlihatkan inti perbedaan antara mekanika klasik dan mekanika kuantum. Dalam mekanika klasik, partikel digambarkan memiliki posisi dan lintasan. Dalam mekanika kuantum, keadaan partikel dinyatakan oleh fungsi gelombang. Oleh karena itu, grafik ψ bukan lintasan partikel. Grafik tersebut adalah representasi matematis keadaan kuantum. Kesadaran ini penting agar mahasiswa tidak menafsirkan fungsi gelombang secara keliru.

4. Output Ketiga: Grafik Rapat Probabilitas $\psi_n^2(x)$

Output ketiga adalah **grafik rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$** . Jika grafik ψ menunjukkan fungsi gelombang, maka grafik ψ^2 menunjukkan distribusi peluang relatif menemukan partikel di sepanjang kotak. Dalam model partikel dalam kotak, fungsi gelombang bersifat real, sehingga rapat probabilitas dapat ditulis sebagai:

$$\rho_n(x) = \psi_n^2(x)$$

Grafik ψ^2 sangat penting karena memperjelas makna fisik fungsi gelombang. Fungsi ψ dapat bernilai positif atau negatif, tetapi ψ^2 selalu tidak negatif. Daerah dengan nilai ψ^2 besar menunjukkan daerah dengan peluang relatif lebih besar untuk menemukan partikel. Daerah dengan $\psi^2 = 0$ menunjukkan titik yang tidak mungkin ditempati partikel pada keadaan tersebut.

Grafik ψ^2 harus memenuhi standar minimal berikut:

1. Sumbu x diberi label $x \text{ (nm)}$.
2. Sumbu y diberi label $\psi_n^2(x)$.
3. Judul grafik jelas, misalnya `Rapat Probabilitas Partikel dalam Kotak`.
4. Setiap kurva memiliki legenda $n = 1$ sampai $n = 5$.
5. Semua nilai grafik tidak negatif.
6. Titik simpul pada grafik ψ tetap menjadi titik nol pada grafik ψ^2 .
7. Grafik disimpan dalam format PNG.

Nama file grafik yang disarankan:

`gambar/grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png`

Dalam analisis, mahasiswa harus membandingkan grafik ψ dan ψ^2 . Perbandingan ini menghasilkan pemahaman penting:

Aspek	Grafik ψ	Grafik ψ^2
Nilai	Dapat positif, negatif, atau nol	Selalu tidak negatif
Makna	Fungsi gelombang	Rapat probabilitas
Simpul	Titik $\psi = 0$	Titik probabilitas nol
Interpretasi	Tidak langsung sebagai peluang	Berkaitan dengan peluang posisi
Peran pedagogis	Memahami fase dan bentuk gelombang	Memahami distribusi probabilitas

Grafik ψ^2 untuk $n = 2$, misalnya, menunjukkan probabilitas nol di tengah kotak. Ini dapat tampak bertentangan dengan intuisi klasik. Dalam gambaran klasik, partikel yang bergerak dari kiri ke kanan seharusnya melewati tengah. Dalam gambaran kuantum, keadaan $n = 2$ memiliki simpul di tengah, sehingga probabilitas menemukan partikel tepat di titik tersebut adalah nol. Hal ini menegaskan bahwa model kuantum tidak boleh ditafsirkan dengan konsep lintasan klasik secara langsung.

5. Output Keempat: Grafik Energi terhadap n

Output keempat adalah **grafik energi terhadap bilangan kuantum n** . Grafik ini dibuat dari tabel energi dan menunjukkan hubungan antara n dan E_n . Secara teori:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

Karena L dan m tetap, maka:

$$E_n \propto n^2$$

Grafik energi terhadap n harus memperlihatkan kenaikan energi yang tidak linear. Titik-titik energi $n = 1$ sampai 5 tidak membentuk garis lurus dengan kenaikan sama, tetapi membentuk pola kenaikan kuadratik. Grafik ini sangat penting karena menunjukkan bahwa tingkat energi tidak berjarak sama. Semakin besar n , selisih energi antara tingkat berurutan makin besar.

Grafik energi terhadap n harus memenuhi standar minimal berikut:

1. Sumbu x diberi label Bilangan kuantum n .
2. Sumbu y diberi label Energi (eV) atau Energi (J).
3. Judul grafik jelas, misalnya Energi Partikel dalam Kotak terhadap n .
4. Titik data ditampilkan dengan marker.
5. Grafik disimpan dalam format PNG.
6. Data grafik berasal dari tabel energi yang sama dengan file CSV.

Nama file grafik yang disarankan:

gambar/grafik_energi_terhadap_n.png

Dalam laporan, grafik energi terhadap n harus digunakan untuk menjelaskan kuantisasi energi. Mahasiswa perlu menunjukkan bahwa energi hanya dihitung untuk n bilangan bulat positif. Jika n dinaikkan, energi naik mengikuti n^2 . Grafik ini dapat dibandingkan dengan grafik fungsi

gelombang: ketika n naik, energi naik dan jumlah simpul bertambah. Dengan demikian, grafik energi tidak berdiri sendiri, tetapi harus dihubungkan dengan grafik ψ .

Interpretasi grafik energi harus hati-hati. Mahasiswa tidak boleh menulis bahwa energi “kontinu naik” seperti energi klasik. Yang benar, grafik menghubungkan titik-titik energi diskrit. Garis pada grafik hanya membantu mata melihat pola, tetapi energi yang diperbolehkan tetap hanya pada $n = 1, 2, 3$, dan seterusnya. Ini penting agar mahasiswa tidak salah memahami grafik sebagai spektrum energi kontinu.

6. Output Kelima: File CSV Hasil Perhitungan

Output kelima adalah **file CSV hasil perhitungan**. CSV adalah format data teks sederhana yang menyimpan tabel dalam bentuk kolom dan baris. Dalam praktikum ini, file CSV penting karena menyimpan data numerik secara terbuka, ringan, dan mudah dibaca ulang. CSV dapat dibuka menggunakan Python, spreadsheet, editor teks, atau software statistik.

File CSV wajib minimal adalah:

```
data/energi_partikel_dalam_kotak.csv
```

File ini berisi tabel energi untuk $n = 1$ sampai 5. Selain itu, karena subbab 4.5 telah memasukkan simulasi perubahan panjang kotak, file CSV tambahan yang disarankan adalah:

```
data/simulasi_panjang_kotak.csv
```

File pertama memuat energi terhadap n . File kedua memuat pengaruh panjang kotak terhadap energi keadaan dasar. Keduanya penting untuk analisis.

Struktur file `energi_partikel_dalam_kotak.csv`:

```
n,energi_joule,energi_ev,rasio_E_n_terhadap_E_1
1,...
2,...
3,...
4,...
5,...
```

Struktur file `simulasi_panjang_kotak.csv`:

```
L_nm,E1_joule,E1_ev
0.5,...
0.75,...
1.0,...
1.5,...
2.0,...
```

CSV memiliki kedudukan penting dalam reproduibilitas. Grafik dapat rusak atau sulit dibaca ulang, tetapi CSV tetap menyimpan data sumber. Jika dosen ingin memeriksa grafik energi terhadap n , dosen dapat membuka CSV dan melihat apakah data sesuai. Jika mahasiswa ingin

membuat ulang grafik dengan format lebih baik, CSV dapat dibaca kembali. Jika laporan perlu direvisi, data tidak perlu dihitung ulang dari awal.

File CSV juga mencegah praktik penyalinan manual yang rawan kesalahan. Jika mahasiswa menyalin angka dari layar ke laporan satu per satu, risiko salah ketik besar. Dengan CSV, data dapat diimpor ke laporan atau spreadsheet secara lebih tertib.

7. Output Tambahan yang Disarankan: Grafik Pengaruh Panjang Kotak terhadap Energi

Walaupun daftar output utama dalam silabus menyebut tabel energi, grafik ψ , grafik ψ^2 , grafik energi terhadap n , dan CSV, Praktikum 1 juga menuntut simulasi perubahan panjang kotak pada subbab 4.5. Karena itu, output tambahan yang sangat disarankan adalah grafik pengaruh panjang kotak terhadap energi keadaan dasar.

Nama file grafik:

`gambar/grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png`

Grafik ini menunjukkan hubungan:

$$E_1 \propto 1/L^2$$

Sumbu x adalah panjang kotak L dalam nm. Sumbu y adalah energi keadaan dasar E_1 dalam eV. Grafik harus menunjukkan bahwa energi menurun ketika L bertambah. Jika L diperbesar dua kali, energi menjadi seperempat. Jika L diperkecil setengah, energi menjadi empat kali lebih besar.

Output ini penting karena menghubungkan model partikel dalam kotak dengan konsep delokalisasi elektron π . Dalam sistem terkonjugasi, semakin panjang daerah delokalisasi, jarak tingkat energi cenderung mengecil secara kualitatif. Grafik pengaruh L terhadap energi membantu mahasiswa membangun intuisi tersebut.

8. Output Tambahan yang Disarankan: Ringkasan Numerik di Terminal

Selain file CSV dan gambar, kode sebaiknya menampilkan ringkasan numerik di terminal atau notepad. Ringkasan ini membantu mahasiswa langsung melihat hasil utama setelah kode dijalankan.

Contoh ringkasan numerik:

```
Kesimpulan numerik:
Untuk L = 1.00 nm, energi keadaan dasar E1 = ... eV.
Rasio E2/E1 = 4.0.
Rasio E3/E1 = 9.0.
Energi meningkat sebanding dengan n^2.
Energi keadaan dasar menurun ketika panjang kotak L diperbesar.
```

Ringkasan numerik tidak menggantikan laporan, tetapi membantu validasi cepat. Jika ringkasan menunjukkan E_2/E_1 bukan 4, berarti ada kesalahan. Jika ringkasan menunjukkan energi naik ketika L diperbesar, berarti rumus atau satuan salah. Dengan demikian, output terminal menjadi alat pengecekan awal.

Namun, ringkasan di terminal tidak cukup sebagai output final karena mudah hilang. Ringkasan harus didukung oleh CSV dan grafik. Jika ingin lebih tertib, ringkasan dapat disimpan dalam file teks:

```
output/ringkasan_praktikum_01.txt
```

Isi file tersebut dapat berupa hasil utama dan catatan validasi.

9. Standar Kualitas Tabel Output

Tabel output harus memenuhi standar kualitas tertentu agar layak dimasukkan ke laporan. Standar tersebut meliputi:

1. **Nama kolom jelas.**
Gunakan `energi_joule`, bukan hanya `energi`. Gunakan `energi_ev`, bukan `E`.
2. **Satuan tercantum dalam nama kolom.**
Ini mencegah salah interpretasi.
3. **Nilai n dimulai dari 1.**
Tidak boleh ada $n = 0$ sebagai keadaan fisik.
4. **Rasio energi sesuai n^2 .**
Rasio menjadi validasi internal.
5. **Tidak ada kolom tidak jelas.**
Kolom seperti `x`, `y`, atau `hasil` tanpa keterangan harus dihindari.
6. **Data disimpan dalam CSV.**
Tabel yang hanya muncul di layar belum cukup.
7. **Tabel sesuai dengan grafik.**
Data grafik energi terhadap n harus berasal dari tabel yang sama.

Contoh tabel yang kurang baik:

```
n, E, a, b
1, ...
2, ...
```

Tabel tersebut tidak jelas. Apa itu E ? Apa satuannya? Apa itu a dan b ? Tabel yang baik:

```
n, energi_joule, energi_ev, rasio_E_n_terhadap_E_1
1, ...
2, ...
```

Keterbacaan tabel adalah bagian dari keterbacaan ilmiah.

10. Standar Kualitas Grafik Output

Grafik output juga harus memenuhi standar kualitas. Grafik yang tidak memiliki label sumbu tidak layak untuk laporan karena pembaca tidak tahu makna data. Grafik yang tidak memiliki satuan juga tidak lengkap. Grafik dengan kurva banyak tetapi tanpa legenda membingungkan.

Standar grafik minimal:

Unsur Grafik	Standar
Judul	Menjelaskan isi grafik
Sumbu x	Memiliki label dan satuan
Sumbu y	Memiliki label dan satuan jika relevan
Legenda	Ada jika lebih dari satu kurva
Resolusi	Cukup untuk laporan, misalnya 300 dpi
Format	PNG atau PDF
Sumber data	Berasal dari kode dan CSV
Nama file	Jelas dan konsisten

Contoh judul yang baik:

Fungsi Gelombang Partikel dalam Kotak
 Rapat Probabilitas Partikel dalam Kotak
 Energi Partikel dalam Kotak terhadap n
 Pengaruh Panjang Kotak terhadap Energi E_1

Contoh label sumbu yang baik:

x (nm)
 $\psi_n(x)$
 $\psi_n^2(x)$
 Energi (eV)
 Bilangan kuantum n
 Panjang kotak L (nm)

Mahasiswa harus menghindari grafik yang terlalu dekoratif. Warna, gaya garis, dan tampilan visual boleh membantu keterbacaan, tetapi tidak boleh mengganggu interpretasi. Tujuan grafik adalah menjelaskan data, bukan sekadar memperindah laporan.

11. Validasi Output

Output tidak cukup dihasilkan; output harus divalidasi. Validasi memastikan bahwa tabel dan grafik sesuai dengan teori. Pada Praktikum 1, validasi output dapat dilakukan melalui beberapa pemeriksaan.

Validasi tabel energi:

Pemeriksaan	Hasil yang Benar
n dimulai dari	1
E_2/E_1	4
E_3/E_1	9
E_4/E_1	16
E_5/E_1	25

Validasi grafik ψ :

Pemeriksaan	Hasil yang Benar
$\psi(0)$	0
$\psi(L)$	0
Jumlah simpul $n = 1$	0
Jumlah simpul $n = 2$	1
Jumlah simpul $n = 3$	2
Jumlah simpul $n = 5$	4

Validasi grafik ψ^2 :

Pemeriksaan	Hasil yang Benar
Nilai ψ^2	Tidak negatif
Titik simpul	$\psi^2 = 0$
$n = 1$	Probabilitas maksimum di sekitar tengah kotak
$n = 2$	Probabilitas nol di tengah kotak

Validasi grafik panjang kotak:

Pemeriksaan	Hasil yang Benar
L bertambah	E_1 menurun
L menjadi 2L	E_1 menjadi 1/4
L menjadi L/2	E_1 menjadi 4 kali

Validasi harus menjadi bagian dari laporan. Jika mahasiswa hanya menampilkan output tanpa validasi, laporan kurang kuat. Validasi menunjukkan bahwa mahasiswa tidak hanya menjalankan kode, tetapi juga memahami apakah hasilnya masuk akal.

12. Kesalahan Umum pada Output Kode

Beberapa kesalahan umum yang perlu dihindari:

- 1. Tabel energi tidak disimpan sebagai CSV.**

Output hanya muncul di layar, sehingga tidak dapat diperiksa ulang.

2. **Grafik ψ dan ψ^2 tertukar.**
Mahasiswa menampilkan grafik ψ tetapi memberi judul ψ^2 , atau sebaliknya.
3. **Sumbu tidak memiliki satuan.**
Misalnya sumbu x hanya ditulis x , padahal seharusnya x (nm).
4. **Energi dalam joule ditulis sebagai eV.**
Ini kesalahan satuan yang serius.
5. **$n = 0$ dimasukkan ke tabel energi.**
Ini kesalahan konseptual karena $n = 0$ tidak merepresentasikan keadaan partikel dalam kotak.
6. **Grafik energi terhadap n dianggap kontinu.**
Garis pada grafik hanya penghubung titik; energi yang diperbolehkan tetap diskrit.
7. **File gambar tidak diberi nama jelas.**
Misalnya gambar1.png, gambar2.png, dan plot.png.
8. **CSV dan grafik berasal dari kode berbeda.**
Ini merusak reproduibilitas.
9. **Output tidak sesuai folder.**
CSV tersimpan di folder gambar, atau grafik tersimpan di folder data.
10. **Laporan menggunakan grafik lama.**
Kode sudah diperbaiki, tetapi grafik yang dimasukkan ke laporan masih versi lama.

Kesalahan-kesalahan tersebut dapat dicegah dengan menjalankan kode dari awal, memeriksa folder output, membuka CSV, membuka grafik, dan membandingkan dengan teori sebelum laporan disusun.

13. Hubungan Output dengan Laporan Praktikum

Output kode harus digunakan secara langsung dalam laporan. Struktur penggunaannya dapat diatur sebagai berikut:

Bagian Laporan	Output yang Digunakan
Hasil perhitungan energi	Tabel energi CSV
Visualisasi fungsi gelombang	Grafik ψ
Visualisasi probabilitas	Grafik ψ^2
Analisis kuantisasi	Grafik energi terhadap n
Analisis panjang kotak	CSV dan grafik pengaruh L
Pembahasan	Semua output
Lampiran	File kode dan CSV

Dalam laporan, mahasiswa harus menyebut nama file output. Misalnya:

Tabel energi pada Gambar/Tabel 1 diperoleh dari file
``data/energi_partikel_dalam_kotak.csv``, yang dihasilkan oleh kode
``praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py``.

Atau:

Grafik fungsi gelombang disimpan dalam file
 `gambar/grafik\_fungsi\_gelombang\_psi.png`.

Penyebutan nama file membuat laporan lebih transparan. Dosen dapat mencocokkan laporan dengan folder praktikum. Jika tabel di laporan berbeda dari CSV, berarti ada masalah.

14. Output sebagai Bukti Pemahaman Konsep

Output kode bukan hanya hasil teknis. Output adalah bukti pemahaman konsep. Setiap output harus dikaitkan dengan konsep tertentu:

Output	Konsep yang Dibuktikan
Tabel energi	Kuantisasi energi dan pola $E_n \propto n^2$
Grafik ψ	Bentuk fungsi gelombang dan simpul
Grafik ψ^2	Rapat probabilitas
Grafik energi terhadap n	Kenaikan energi kuadratik
CSV	Reprodusibilitas data
Grafik L terhadap energi	Hubungan $E \propto 1/L^2$

Jika mahasiswa hanya menghasilkan output tanpa analisis, output belum menjadi bukti pemahaman. Output menjadi bermakna ketika mahasiswa mampu menjelaskan apa yang ditunjukkan output tersebut. Misalnya, grafik ψ bukan hanya menunjukkan garis sinus; grafik itu menunjukkan keadaan kuantum yang memenuhi syarat batas. Grafik ψ^2 bukan hanya garis positif; grafik itu menunjukkan distribusi probabilitas. Tabel energi bukan hanya angka; tabel itu menunjukkan energi diskrit.

15. Analisis Kritis terhadap Output Digital

Output digital memiliki kelebihan, tetapi juga risiko. Kelebihannya adalah mudah disimpan, mudah dibagikan, mudah diperiksa, dan mudah direproduksi. Risiko utamanya adalah mahasiswa dapat memperlakukan output sebagai hasil otomatis yang tidak perlu dipahami. Grafik yang tampak rapi dapat menutupi kesalahan rumus. Tabel yang terlihat profesional dapat berisi satuan yang salah. CSV dapat berasal dari data lama. Karena itu, output digital harus selalu disertai validasi dan interpretasi.

Dalam praktikum kimia kuantum, output yang benar secara teknis belum tentu benar secara konseptual. Misalnya, kode bisa menghasilkan grafik untuk $n = 0$ jika mahasiswa memasukkan `np.arange(0, 6)`. Grafik itu dapat tampil rapi, tetapi secara fisik salah. Kode juga dapat menghasilkan energi sangat kecil jika L ditulis 1 meter, bukan 1 nm. Python tidak akan menolak karena secara matematis perhitungan tetap valid. Di sinilah peran mahasiswa sebagai praktikan ilmiah: memeriksa apakah output masuk akal secara teori.

Output digital juga harus dilindungi dari manipulasi manual. Grafik tidak boleh diubah secara visual untuk membuat hasil tampak lebih sesuai. Data tidak boleh diedit di CSV tanpa mencatat alasan. Jika ada kesalahan, perbaiki kode dan hasilkan ulang output. Dengan cara ini, jejak ilmiah tetap bersih.

16. Checklist Output Kode

Sebelum menyusun laporan, mahasiswa harus memeriksa checklist berikut:

- [] File kode praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py sudah dijalankan.
- [] File data/energi_partikel_dalam_kotak.csv tersedia.
- [] File data/simulasi_panjang_kotak.csv tersedia.
- [] Grafik fungsi gelombang ψ tersedia.
- [] Grafik rapat probabilitas ψ^2 tersedia.
- [] Grafik energi terhadap n tersedia.
- [] Grafik panjang kotak terhadap energi tersedia.
- [] Tabel energi memuat $n = 1$ sampai 5.
- [] Rasio E_n/E_1 sesuai n^2 .
- [] Grafik ψ memiliki simpul sesuai $n - 1$.
- [] Grafik ψ^2 tidak bernilai negatif.
- [] Semua grafik memiliki judul, label sumbu, satuan, dan legenda.
- [] File output berada di folder yang benar.
- [] Laporan menggunakan output terbaru.

Checklist ini sangat praktis. Mahasiswa sebaiknya tidak mengumpulkan laporan sebelum semua butir terpenuhi. Dosen juga dapat menggunakan checklist ini sebagai rubrik pemeriksaan awal.

17. Contoh Struktur Output Akhir

Setelah kode dijalankan, struktur folder yang ideal adalah:

```
praktikum_01_partikel_dalam_kotak/
├── python/
│   └── praktikum_01_partikel_dalam_kotak.py
├── data/
│   ├── energi_partikel_dalam_kotak.csv
│   └── simulasi_panjang_kotak.csv
├── gambar/
│   ├── grafik_fungsi_gelombang_psi.png
│   ├── grafik_rapat_probabilitas_psi_kuadrat.png
│   ├── grafik_energi_terhadap_n.png
│   └── grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png
├── output/
│   └── ringkasan_praktikum_01.txt
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_01_partikel_dalam_kotak.docx
```

Struktur ini memperlihatkan hubungan lengkap antara kode, data, gambar, ringkasan, dan laporan. Jika folder seperti ini tersedia, praktikum dapat diperiksa secara sistematis. Jika laporan menyebutkan grafik energi, file gambar tersedia. Jika laporan menyebutkan tabel energi, CSV tersedia. Jika dosen ingin menjalankan ulang, file kode tersedia.

18. Implikasi Pedagogis Output Kode

Output kode memiliki implikasi pedagogis yang besar. Pertama, mahasiswa belajar bahwa hasil ilmiah harus terdokumentasi. Kedua, mahasiswa belajar membedakan data mentah, data terolah, grafik, dan interpretasi. Ketiga, mahasiswa belajar memeriksa kesesuaian output dengan teori. Keempat, mahasiswa belajar bahwa grafik harus dibaca, bukan hanya dibuat. Kelima, mahasiswa belajar bahwa setiap angka dalam laporan harus dapat ditelusuri ke kode.

Dalam konteks pembelajaran kimia kuantum, output kode juga membantu mahasiswa memahami konsep abstrak secara visual. Kuantisasi energi terlihat pada tabel dan grafik energi. Fungsi gelombang terlihat pada grafik ψ . Rapat probabilitas terlihat pada grafik ψ^2 . Simpul terlihat pada titik nol grafik. Pengaruh panjang kotak terlihat pada grafik L terhadap energi. Dengan output ini, konsep yang sebelumnya abstrak menjadi data yang dapat diamati dan dianalisis.

19. Transisi ke Subbab Analisis

Subbab 4.7 menetapkan output yang harus dihasilkan oleh kode. Namun, output belum cukup. Tabel dan grafik baru menjadi bermakna jika dianalisis. Oleh karena itu, subbab berikutnya akan membahas **analisis**. Pada subbab 4.8, mahasiswa akan diarahkan untuk menjelaskan hubungan antara kuantisasi energi, panjang kotak, simpul, dan probabilitas. Analisis inilah yang mengubah output menjadi pemahaman kimia kuantum.

Dengan demikian, urutan praktikum menjadi lengkap: subbab 4.5 menjelaskan jalur Python mandiri, subbab 4.6 menetapkan nama file kode, subbab 4.7 menetapkan output kode, dan subbab 4.8 akan menjelaskan cara membaca serta menafsirkan output tersebut.

4.8 Analisis

Analisis dalam Praktikum 1 adalah proses menafsirkan tabel energi, grafik fungsi gelombang ψ , grafik rapat probabilitas ψ^2 , grafik energi terhadap n , dan grafik pengaruh panjang kotak terhadap energi. Analisis bukan sekadar menyalin hasil output kode ke laporan, tetapi menjelaskan **mengapa** hasil tersebut muncul, **apa makna teoritisnya**, **bagaimana hubungannya dengan model partikel dalam kotak**, serta **apa implikasinya bagi pemahaman kimia kuantum**. Dengan demikian, analisis adalah bagian yang mengubah output komputasi menjadi pengetahuan ilmiah.

Dalam praktikum ini, mahasiswa harus menjelaskan hubungan antara empat konsep utama:

1. **Kuantisasi energi.**
2. **Panjang kotak L .**
3. **Simpul fungsi gelombang.**
4. **Rapat probabilitas ψ^2 .**

Keempat konsep tersebut tidak berdiri sendiri. Kuantisasi energi muncul karena fungsi gelombang harus memenuhi syarat batas. Syarat batas menghasilkan pola gelombang tertentu. Pola gelombang ditentukan oleh bilangan kuantum n . Bilangan kuantum n menentukan jumlah simpul. Jumlah

simpul berkaitan dengan bentuk fungsi gelombang dan energi. Rapat probabilitas diperoleh dari kuadrat fungsi gelombang. Panjang kotak mengubah kelengkungan fungsi gelombang dan memengaruhi energi. Oleh karena itu, analisis praktikum harus menunjukkan keterkaitan antarkonsep, bukan membahasnya secara terpisah.

Secara teoritis, model partikel dalam kotak satu dimensi memberikan salah satu contoh paling jelas tentang bagaimana persamaan Schrödinger menghasilkan tingkat energi diskrit. Fungsi gelombang yang diperbolehkan berbentuk sinus ternormalisasi dan hanya nilai n bilangan bulat positif yang menghasilkan keadaan fisik. Setiap nilai n menghasilkan fungsi gelombang berbeda, energi berbeda, dan jumlah simpul berbeda. Rujukan kimia kuantum menyatakan bahwa fungsi gelombang partikel dalam kotak berbentuk $\sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$, dan setiap kenaikan n menambah jumlah simpul pada fungsi gelombang.

1. Analisis Kuantisasi Energi

Kuantisasi energi adalah konsep pertama yang harus dianalisis. Dalam model partikel dalam kotak, energi partikel hanya dapat memiliki nilai tertentu yang diberikan oleh persamaan:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

dengan:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Persamaan ini menunjukkan bahwa energi tidak dapat bernilai sembarang. Energi hanya muncul pada tingkat-tingkat tertentu yang ditentukan oleh bilangan kuantum n . Dalam laporan, mahasiswa harus menjelaskan bahwa kuantisasi energi muncul karena fungsi gelombang harus memenuhi syarat batas:

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 0 \\ \psi(L) &= 0\end{aligned}$$

Syarat batas ini membuat hanya gelombang tertentu yang dapat “muat” di dalam kotak. Gelombang yang tidak memenuhi syarat batas tidak merepresentasikan keadaan fisik yang diperbolehkan.

Tabel energi harus dianalisis melalui rasio:

$$E_n/E_1 = n^2$$

Jika kode dijalankan dengan benar, tabel energi akan menunjukkan pola:

n	Rasio E_n/E_1
1	1
2	4
3	9
4	16

5	25

Pola ini sangat penting. Mahasiswa harus menulis bahwa energi keadaan $n = 2$ adalah empat kali energi keadaan dasar, bukan dua kali. Energi keadaan $n = 3$ adalah sembilan kali energi keadaan dasar, bukan tiga kali. Artinya, kenaikan energi tidak linear terhadap n , melainkan kuadratik.

Analisis yang baik tidak hanya menyebut angka, tetapi menjelaskan makna fisiknya. Ketika n meningkat, fungsi gelombang berosilasi lebih cepat. Osilasi yang lebih cepat berarti kelengkungan fungsi gelombang lebih besar. Dalam persamaan Schrödinger, kelengkungan fungsi gelombang berkaitan dengan energi kinetik. Karena itu, keadaan dengan n lebih tinggi memiliki energi lebih besar.

Mahasiswa juga harus menjelaskan bahwa $n = 0$ tidak diperbolehkan. Jika $n = 0$, fungsi gelombang menjadi nol di seluruh kotak:

$$\psi_0(x) = 0$$

Jika $\psi = 0$ di seluruh kotak, maka ψ^2 juga nol di seluruh kotak. Artinya, probabilitas menemukan partikel di mana pun adalah nol. Keadaan semacam ini tidak merepresentasikan partikel yang ada. Oleh karena itu, keadaan energi terendah adalah $n = 1$, bukan $n = 0$. Rujukan kimia kuantum menjelaskan bahwa energi keadaan dasar partikel dalam kotak tidak nol, berbeda dengan gambaran klasik partikel diam yang dapat memiliki energi kinetik nol.

2. Analisis Hubungan n , Energi, dan Simpul

Konsep kedua yang harus dianalisis adalah hubungan antara bilangan kuantum n , energi, dan jumlah simpul. Simpul adalah titik di dalam kotak tempat fungsi gelombang bernilai nol. Pada titik simpul, rapat probabilitas juga nol. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi, jumlah simpul internal adalah:

$$\text{jumlah simpul internal} = n - 1$$

Hubungan ini dapat ditulis:

n	Jumlah Simpul Internal	Rasio E_n/E_1
1	0	1
2	1	4
3	2	9
4	3	16
5	4	25

Tabel ini menunjukkan bahwa kenaikan n menyebabkan dua hal sekaligus: energi meningkat dan jumlah simpul bertambah. Dengan demikian, simpul bukan sekadar ciri geometris grafik, tetapi berkaitan langsung dengan tingkat energi.

Analisis grafik ψ harus menunjukkan bahwa $n = 1$ tidak memiliki simpul internal. Fungsi gelombang hanya bernilai nol pada batas kotak, yaitu $x = 0$ dan $x = L$. Untuk $n = 2$, terdapat satu simpul internal di tengah kotak. Untuk $n = 3$, terdapat dua simpul internal. Untuk $n = 4$, terdapat tiga simpul internal. Untuk $n = 5$, terdapat empat simpul internal.

Secara konseptual, semakin banyak simpul berarti fungsi gelombang berubah tanda lebih sering dan berosilasi lebih cepat. Fungsi yang berosilasi lebih cepat memiliki kelengkungan lebih besar. Karena operator energi kinetik dalam persamaan Schrödinger melibatkan turunan kedua terhadap posisi, kelengkungan fungsi gelombang berkaitan dengan energi. Oleh karena itu, jumlah simpul yang lebih banyak mengindikasikan keadaan energi yang lebih tinggi.

Dalam laporan, mahasiswa dapat menulis analisis seperti berikut:

Grafik fungsi gelombang menunjukkan bahwa jumlah simpul internal bertambah ketika n meningkat. Keadaan $n = 1$ tidak memiliki simpul internal, sedangkan $n = 5$ memiliki empat simpul internal. Hal ini sesuai dengan hubungan jumlah simpul $= n - 1$. Bertambahnya simpul menunjukkan bahwa fungsi gelombang berosilasi lebih cepat, sehingga energi keadaan tersebut lebih tinggi.

Analisis tersebut baik karena menghubungkan grafik, teori, dan energi.

3. Analisis Fungsi Gelombang ψ

Fungsi gelombang ψ adalah objek matematis yang menggambarkan keadaan kuantum partikel. Dalam model partikel dalam kotak:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

Grafik ψ harus dianalisis berdasarkan bentuk, syarat batas, tanda, dan simpul. Pertama, fungsi gelombang harus bernilai nol pada $x = 0$ dan $x = L$. Ini menunjukkan bahwa partikel tidak dapat ditemukan di luar kotak dan fungsi gelombang memenuhi syarat batas. Jika grafik tidak bernilai nol pada batas, maka kode atau skala grafik perlu diperiksa.

Kedua, ψ dapat bernilai positif, negatif, atau nol. Nilai negatif pada ψ tidak berarti probabilitas negatif. Ini adalah kesalahan konseptual yang harus dihindari. Fungsi gelombang memiliki tanda atau fase, sedangkan probabilitas diperoleh dari kuadrat fungsi gelombang. Dalam kimia molekuler, tanda atau fase fungsi gelombang sangat penting karena berkaitan dengan interferensi konstruktif dan destruktif dalam pembentukan orbital molekuler.

Ketiga, bentuk ψ berubah ketika n berubah. Untuk n rendah, fungsi gelombang lebih sederhana. Untuk n tinggi, fungsi gelombang memiliki lebih banyak osilasi. Ini menunjukkan bahwa bilangan kuantum n tidak hanya menentukan energi, tetapi juga bentuk keadaan kuantum. Mahasiswa harus menjelaskan bahwa setiap grafik ψ merepresentasikan keadaan kuantum yang berbeda.

Keempat, grafik ψ membantu mahasiswa memahami bahwa partikel kuantum tidak dideskripsikan sebagai benda kecil yang bergerak bolak-balik dengan lintasan pasti. Jika dipahami secara klasik,

grafik ψ mungkin disalahartikan sebagai lintasan partikel. Padahal, ψ bukan lintasan. ψ adalah fungsi keadaan. Informasi posisi diperoleh dari ψ^2 sebagai rapat probabilitas.

Analisis ψ harus ditulis dengan bahasa yang hati-hati. Mahasiswa tidak boleh menulis “partikel bergerak mengikuti kurva ψ .” Pernyataan itu salah. Pernyataan yang benar adalah “kurva ψ menggambarkan fungsi gelombang keadaan kuantum partikel, sedangkan peluang relatif menemukan partikel diperoleh dari ψ^2 .”

4. Analisis Rapat Probabilitas ψ^2

Rapat probabilitas adalah kuadrat fungsi gelombang:

$$\rho_n(x) = \psi_n^2(x)$$

Karena fungsi gelombang dalam model ini real, ψ^2 dapat digunakan langsung sebagai rapat probabilitas relatif. Grafik ψ^2 menunjukkan distribusi peluang relatif menemukan partikel di sepanjang kotak. Daerah dengan ψ^2 besar menunjukkan peluang relatif lebih besar. Daerah dengan $\psi^2 = 0$ menunjukkan titik yang tidak mungkin ditempati partikel pada keadaan tersebut.

Analisis grafik ψ^2 harus menekankan beberapa hal.

Pertama, ψ^2 selalu tidak negatif. Ini sesuai dengan makna probabilitas. Probabilitas tidak mungkin negatif. Jika grafik ψ^2 menunjukkan nilai negatif, berarti ada kesalahan dalam kode atau grafik.

Kedua, titik simpul pada ψ tetap menjadi titik nol pada ψ^2 . Jika $\psi = 0$, maka $\psi^2 = 0$. Dengan demikian, simpul memiliki makna probabilistik: partikel tidak mungkin ditemukan di titik tersebut pada keadaan kuantum yang bersangkutan.

Ketiga, bentuk ψ^2 berbeda dari ψ . Nilai negatif pada ψ menjadi positif setelah dikuadratkan. Oleh karena itu, grafik ψ^2 sering memiliki puncak pada daerah yang sesuai dengan amplitudo besar dari ψ , baik ψ positif maupun negatif.

Keempat, untuk $n = 1$, rapat probabilitas maksimum berada di sekitar tengah kotak. Untuk $n = 2$, rapat probabilitas nol di tengah kotak karena di sana terdapat simpul. Hal ini tampak aneh secara klasik, tetapi merupakan konsekuensi langsung dari bentuk fungsi gelombang. Rujukan kimia kuantum menekankan bahwa paradoks semacam ini muncul ketika perilaku partikel mikroskopik dipaksa dipahami dengan intuisi benda makroskopik klasik.

Mahasiswa dapat menulis analisis seperti berikut:

Grafik ψ^2 menunjukkan bahwa rapat probabilitas selalu bernilai tidak negatif. Pada keadaan $n = 2$, rapat probabilitas bernilai nol di tengah kotak karena fungsi gelombang memiliki simpul di titik tersebut. Hal ini menunjukkan bahwa titik simpul adalah daerah dengan probabilitas nol. Dengan demikian, grafik ψ^2 memberikan informasi fisik tentang peluang relatif menemukan partikel, sedangkan grafik ψ menunjukkan bentuk matematis fungsi gelombang.

Analisis semacam ini memperlihatkan bahwa mahasiswa memahami perbedaan ψ dan ψ^2 .

5. Analisis Hubungan Panjang Kotak dengan Energi

Hubungan panjang kotak dengan energi merupakan bagian sangat penting dari praktikum. Persamaan energi menunjukkan:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

Jika n dan m tetap, maka:

$$E_n \propto 1/L^2$$

Artinya, energi berbanding terbalik dengan kuadrat panjang kotak. Jika panjang kotak diperbesar, energi turun. Jika panjang kotak diperkecil, energi naik. Hubungan ini harus dianalisis dari file `simulasi_panjang_kotak.csv` dan grafik `grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png`.

Mahasiswa harus menjelaskan bahwa ketika L lebih kecil, partikel lebih terlokalisasi. Pembatasan ruang yang lebih kuat menyebabkan fungsi gelombang harus berubah lebih tajam di dalam ruang yang lebih pendek. Perubahan yang lebih tajam berkaitan dengan energi kinetik yang lebih tinggi. Sebaliknya, ketika L lebih besar, fungsi gelombang dapat tersebar dalam ruang yang lebih panjang, sehingga energi lebih rendah.

Contoh analisis:

Hasil simulasi menunjukkan bahwa energi keadaan dasar E_1 menurun ketika panjang kotak L diperbesar. Hal ini sesuai dengan hubungan $E_1 \propto 1/L^2$. Ketika L menjadi dua kali lebih besar, energi menjadi sekitar seperempat nilai semula. Dengan demikian, ukuran ruang yang tersedia bagi partikel memiliki pengaruh besar terhadap energi kuantum.

Analisis ini harus dikaitkan dengan konsep delokalisasi. Dalam kimia, elektron yang lebih terdelokalisasi memiliki ruang efektif yang lebih besar. Model partikel dalam kotak memberi intuisi bahwa semakin panjang daerah delokalisasi, semakin kecil jarak energi antar tingkat. Inilah alasan model ini sering dipakai secara kualitatif untuk memahami elektron π dalam molekul terkonjugasi. Rujukan kimia kuantum yang digunakan dalam buku ini menjelaskan bahwa perluasan panjang konjugasi menurunkan jarak tingkat energi dan dapat menggeser absorpsi ke panjang gelombang lebih besar.

6. Analisis Hubungan Kuantisasi dan Panjang Kotak

Kuantisasi energi dan panjang kotak harus dianalisis bersama. Persamaan E_n menunjukkan dua pengaruh sekaligus:

$$E_n \propto n^2$$

dan:

$$E_n \propto 1/L^2$$

Artinya, energi naik ketika n naik, tetapi turun ketika L naik. Dengan demikian, energi ditentukan oleh keadaan kuantum sekaligus ukuran ruang. Mahasiswa harus memahami bahwa n dan L memainkan peran berbeda. n menentukan tingkat energi yang ditempati partikel. L menentukan skala energi keseluruhan.

Jika L tetap dan n berubah, energi berubah karena keadaan kuantum berubah. Jika n tetap dan L berubah, energi berubah karena ukuran kotak berubah. Analisis yang baik harus membedakan dua hal ini.

Contoh perbandingan:

Kondisi	Akibat
L tetap, n naik	Energi naik karena $E_n \propto n^2$
n tetap, L naik	Energi turun karena $E_n \propto 1/L^2$
n tetap, L turun	Energi naik karena pembatasan ruang lebih kuat
L tetap, n turun	Energi turun menuju keadaan dasar

Dalam laporan, mahasiswa perlu menjelaskan bahwa kuantisasi energi tetap ada untuk setiap nilai L . Jika L berubah, nilai tingkat energinya berubah, tetapi energi tetap diskrit. Dengan kata lain, memperbesar kotak tidak membuat energi menjadi kontinu secara langsung; ia hanya membuat jarak antar tingkat menjadi lebih kecil. Untuk L yang sangat besar, jarak antar tingkat dapat menjadi sangat kecil sehingga tampak mendekati kontinu, tetapi dalam model kotak terbatas, tingkatnya tetap diskrit.

Analisis ini penting untuk memahami peralihan antara sistem mikroskopik dan makroskopik. Pada sistem sangat kecil, jarak tingkat energi besar dan efek kuantum jelas. Pada sistem sangat besar, jarak tingkat energi menjadi sangat rapat sehingga perilaku dapat tampak lebih klasik. Model partikel dalam kotak memberi cara sederhana untuk memahami hubungan antara ukuran sistem dan tampaknya efek kuantum.

7. Analisis Simpul dan Probabilitas

Simpul dan probabilitas juga harus dianalisis bersama. Simpul adalah titik tempat $\psi = 0$. Karena probabilitas dinyatakan oleh ψ^2 , maka pada simpul:

$$\psi = 0$$

dan:

$$\psi^2 = 0$$

Artinya, simpul adalah titik dengan probabilitas nol. Mahasiswa harus menjelaskan bahwa simpul bukan hanya titik potong grafik dengan sumbu x, tetapi titik yang memiliki makna fisik: partikel tidak ditemukan di sana pada keadaan tersebut.

Untuk $n = 1$, tidak ada simpul internal, sehingga tidak ada titik di dalam kotak tempat probabilitas selalu nol. Untuk $n = 2$, ada satu simpul internal. Untuk $n = 3$, ada dua simpul internal. Semakin tinggi n , semakin banyak daerah probabilitas yang dipisahkan oleh simpul.

Analisis yang dapat ditulis:

Jumlah simpul internal bertambah sesuai $n - 1$. Pada grafik ψ^2 , simpul tampak sebagai titik tempat rapat probabilitas bernilai nol. Hal ini menunjukkan bahwa keadaan dengan n lebih tinggi tidak hanya memiliki energi lebih besar, tetapi juga distribusi probabilitas yang lebih tersegmentasi. Dengan demikian, simpul menghubungkan bentuk fungsi gelombang, probabilitas, dan energi.

Dalam kimia molekuler, konsep ini sangat penting. Orbital antibonding memiliki simpul antara inti atom. Simpul tersebut menyebabkan kerapatan elektron di daerah antarinti berkurang, sehingga ikatan menjadi tidak stabil atau melemah. Meskipun Praktikum 1 belum membahas orbital molekul secara formal, pemahaman simpul pada model kotak menjadi bekal untuk memahami HOMO, LUMO, orbital bonding, dan antibonding pada bab berikutnya.

8. Analisis Grafik Energi terhadap n

Grafik energi terhadap n harus dianalisis sebagai grafik tingkat energi diskrit. Mahasiswa perlu berhati-hati karena grafik biasanya menampilkan garis yang menghubungkan titik-titik. Garis tersebut hanya alat bantu visual. Energi yang diperbolehkan tetap hanya pada $n = 1, 2, 3, 4$, dan 5 .

Analisis grafik energi terhadap n harus mencakup:

1. Energi meningkat ketika n meningkat.
2. Peningkatan energi mengikuti pola kuadratik.
3. Jarak antara tingkat energi semakin besar untuk n yang lebih tinggi.
4. Grafik tidak merepresentasikan energi kontinu.
5. Setiap titik pada grafik merepresentasikan satu keadaan kuantum yang diperbolehkan.

Contoh analisis:

Grafik energi terhadap n menunjukkan bahwa energi meningkat secara tidak linear. Titik energi untuk $n = 1, 2, 3, 4$, dan 5 membentuk pola kuadratik, sesuai persamaan $E_n \propto n^2$. Walaupun grafik menampilkan garis penghubung, energi yang diperbolehkan tetap diskrit. Garis hanya membantu memperlihatkan kecenderungan kenaikan energi.

Mahasiswa juga dapat menghubungkan grafik energi dengan grafik ψ . Ketika n naik, energi naik dan jumlah simpul bertambah. Dengan demikian, grafik energi dan grafik fungsi gelombang harus dibaca bersama. Grafik energi menunjukkan “berapa besar energi”, sedangkan grafik ψ menunjukkan “seperti apa keadaan kuantumnya.”

9. Analisis Grafik Pengaruh Panjang Kotak

Grafik pengaruh panjang kotak terhadap energi harus dianalisis sebagai bukti hubungan $E \propto 1/L^2$. Jika grafik dibuat untuk E_1 terhadap L , maka grafik harus menurun tajam ketika L kecil dan menjadi lebih landai ketika L besar. Hubungan ini tidak linear.

Mahasiswa harus menjelaskan bahwa energi sangat sensitif terhadap perubahan L . Misalnya, perubahan L dari 0,5 nm menjadi 1,0 nm akan menurunkan energi menjadi seperempat. Namun, perubahan dari 1,5 nm menjadi 2,0 nm tidak menghasilkan penurunan yang sama secara absolut seperti perubahan dari 0,5 nm menjadi 1,0 nm. Ini menunjukkan sifat hubungan kuadrat terbalik.

Analisis yang baik dapat ditulis:

Grafik E_1 terhadap L menunjukkan hubungan menurun yang tidak linear. Energi keadaan dasar sangat tinggi ketika kotak sempit, kemudian menurun ketika panjang kotak bertambah. Pola ini sesuai dengan persamaan $E_1 = h^2/(8mL^2)$. Karena L berada di penyebut dan berpangkat dua, perubahan kecil pada L dapat menghasilkan perubahan energi yang besar.

Hubungan ini dapat dikaitkan dengan sistem elektron π . Jika daerah delokalisasi elektron diperluas, jarak tingkat energi cenderung mengecil. Dalam molekul terkonjugasi panjang, hal ini dapat membantu menjelaskan kecenderungan serapan cahaya bergeser ke panjang gelombang lebih besar. Namun, mahasiswa harus menulis bahwa ini adalah analogi kualitatif, bukan perhitungan spektrum molekul nyata yang akurat.

10. Analisis dengan Contoh Konkret

Untuk memperjelas analisis, mahasiswa dapat menggunakan contoh konkret. Misalnya, jika panjang kotak awal $L = 1,0$ nm, dan kode menghasilkan tabel energi untuk $n = 1$ sampai 5, mahasiswa dapat memfokuskan analisis pada rasio energi. Angka absolut dapat berbeda tergantung satuan dan konstanta, tetapi pola rasio harus tetap.

Contoh analisis berbasis rasio:

Pada $L = 1,0$ nm, energi $n = 2$ memiliki rasio 4 terhadap energi $n = 1$, sedangkan energi $n = 3$ memiliki rasio 9 terhadap energi $n = 1$. Pola ini menunjukkan bahwa energi bergantung pada kuadrat n . Dengan demikian, hasil komputasi sesuai dengan persamaan $E_n = n^2 h^2 / (8mL^2)$.

Contoh analisis berbasis simpul:

Grafik ψ menunjukkan bahwa $n = 1$ tidak memiliki simpul internal, $n = 2$ memiliki satu simpul, dan $n = 3$ memiliki dua simpul. Hal ini sesuai dengan hubungan jumlah simpul internal = $n - 1$. Titik simpul yang terlihat pada grafik ψ juga

muncul sebagai titik nol pada grafik ψ^2 , sehingga simpul memiliki makna probabilistik.

Contoh analisis berbasis panjang kotak:

Simulasi perubahan panjang kotak menunjukkan bahwa energi E_1 menurun ketika L diperbesar. Ketika L meningkat, partikel memiliki ruang lebih luas sehingga fungsi gelombang tidak perlu bersilasi setajam pada kotak sempit. Akibatnya energi menurun.

Contoh-contoh ini dapat dijadikan pola, tetapi mahasiswa harus menggunakan data hasil praktikum sendiri.

11. Analisis Keterkaitan dengan Elektron π

Model partikel dalam kotak dapat digunakan untuk memahami elektron π dalam molekul terkonjugasi secara kualitatif. Dalam molekul terkonjugasi, elektron π dapat terdelokalisasi sepanjang rantai atom karbon. Semakin panjang sistem konjugasi, semakin panjang ruang efektif bagi elektron π . Dalam analogi partikel dalam kotak, hal ini berarti L lebih besar.

Jika L lebih besar, jarak antar tingkat energi lebih kecil. Karena energi transisi berkaitan dengan selisih antara dua tingkat energi, maka sistem dengan L lebih besar cenderung memiliki energi transisi lebih kecil. Energi transisi lebih kecil berkaitan dengan panjang gelombang lebih besar melalui hubungan:

$$\Delta E = hc/\lambda$$

Dengan demikian, model partikel dalam kotak membantu menjelaskan secara kualitatif mengapa molekul dengan konjugasi lebih panjang dapat menyerap cahaya pada panjang gelombang lebih besar.

Namun, analisis ini harus ditulis secara kritis. Elektron π dalam molekul nyata tidak identik dengan partikel tunggal dalam kotak ber dinding tak hingga. Molekul nyata memiliki inti atom, interaksi elektron-elektron, variasi panjang ikatan, efek geometri, dan lingkungan kimia. Karena itu, model partikel dalam kotak hanya memberikan intuisi awal. Untuk perhitungan lebih akurat, diperlukan metode seperti Hückel, Hartree–Fock, DFT, atau metode struktur elektronik lain.

Kalimat analisis yang tepat:

Model partikel dalam kotak dapat digunakan sebagai analogi sederhana untuk elektron π yang terdelokalisasi dalam molekul terkonjugasi. Semakin panjang daerah delokalisasi, semakin kecil jarak tingkat energi secara kualitatif. Namun, model ini tidak menggantikan perhitungan struktur elektronik molekul nyata karena tidak memasukkan potensial inti, interaksi elektron-elektron, dan geometri molekul.

Kalimat ini menunjukkan pemahaman sekaligus kehati-hatian ilmiah.

12. Analisis Keterbatasan Model

Setiap analisis harus memuat keterbatasan model. Model partikel dalam kotak adalah model ideal. Dinding kotak dianggap tak hingga, potensial di dalam kotak dianggap nol, sistem dianggap satu dimensi, dan partikel dianggap tidak berinteraksi dengan partikel lain. Asumsi ini membuat model mudah diselesaikan, tetapi juga membatasi realisme.

Keterbatasan utama:

1. Sistem hanya satu dimensi.
2. Dinding kotak dianggap tak hingga.
3. Potensial di dalam kotak dianggap nol.
4. Partikel tidak berinteraksi dengan partikel lain.
5. Tidak ada struktur inti atom.
6. Tidak ada korelasi elektron.
7. Tidak ada efek pelarut.
8. Tidak ada geometri molekul nyata.

Mahasiswa harus menulis bahwa model ini berguna untuk memahami prinsip dasar, bukan untuk memprediksi sifat molekul nyata secara presisi. Dalam pendidikan kimia kuantum, model sederhana penting karena memberi intuisi. Namun, intuisi tersebut harus dikembangkan lebih lanjut melalui model yang lebih realistis.

Analisis keterbatasan menunjukkan kedewasaan ilmiah. Mahasiswa yang baik tidak hanya menulis bahwa hasil sesuai teori, tetapi juga memahami batas teori yang digunakan.

13. Analisis Kesalahan dan Validasi

Analisis juga harus memuat kemungkinan kesalahan. Dalam praktikum ini, kesalahan dapat berasal dari beberapa sumber:

1. Salah memasukkan panjang kotak.
2. Salah satuan L.
3. Salah faktor konversi joule ke eV.
4. Salah memasukkan n mulai dari 0.
5. Salah menulis rumus fungsi gelombang.
6. Salah membaca grafik ψ dan ψ^2 .
7. Salah menafsirkan garis grafik energi sebagai energi kontinu.
8. Salah menganggap ψ negatif sebagai probabilitas negatif.

Validasi harus dilakukan untuk mencegah kesalahan tersebut. Mahasiswa dapat memvalidasi dengan cara:

$$\begin{aligned} E_2/E_1 &= 4 \\ E_3/E_1 &= 9 \\ \psi(0) &= 0 \\ \psi(L) &= 0 \end{aligned}$$

$$\psi^2 \geq 0$$

jumlah simpul = $n - 1$

E_1 menurun ketika L meningkat

Jika semua validasi terpenuhi, hasil praktikum kuat. Jika ada validasi yang gagal, mahasiswa harus memperbaiki kode sebelum menulis laporan final.

14. Format Penulisan Analisis dalam Laporan

Bagian analisis dalam laporan dapat disusun sebagai berikut:

4. Analisis Hasil

4.1 Analisis Kuantisasi Energi

Menjelaskan tabel energi, rasio E_n/E_1 , dan hubungan $E_n \propto n^2$.

4.2 Analisis Fungsi Gelombang

Menjelaskan bentuk ψ , syarat batas, tanda fungsi gelombang, dan simpul.

4.3 Analisis Rapat Probabilitas

Menjelaskan ψ^2 , probabilitas, titik nol, dan perbandingan dengan ψ .

4.4 Analisis Pengaruh Panjang Kotak

Menjelaskan hubungan $E \propto 1/L^2$ dan hasil simulasi perubahan L .

4.5 Kaitan dengan Elektron π

Menjelaskan analogi model dengan delokalisasi elektron π dalam sistem terkonjugasi.

4.6 Keterbatasan Model

Menjelaskan batas idealisasi partikel dalam kotak.

Struktur ini membantu mahasiswa menulis laporan yang runtut. Analisis tidak boleh hanya berupa satu paragraf singkat. Setiap output harus dibaca dan ditafsirkan.

15. Contoh Analisis Terpadu

Berikut contoh analisis terpadu yang dapat dijadikan acuan gaya penulisan:

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa energi partikel dalam kotak meningkat ketika bilangan kuantum n bertambah. Rasio E_2/E_1 , E_3/E_1 , E_4/E_1 , dan E_5/E_1 masing-masing mengikuti pola 4, 9, 16, dan 25. Pola ini sesuai dengan persamaan $E_n \propto n^2$, sehingga menunjukkan bahwa energi partikel dalam kotak bersifat terkuantisasi.

Grafik fungsi gelombang $\psi_n(x)$ menunjukkan bahwa setiap keadaan memiliki bentuk gelombang yang berbeda. Keadaan $n = 1$ tidak memiliki simpul internal, sedangkan keadaan $n = 5$ memiliki empat simpul internal. Hal ini sesuai dengan hubungan jumlah simpul internal = $n - 1$. Bertambahnya simpul menunjukkan bahwa fungsi gelombang berosilasi lebih cepat, yang berkaitan dengan energi lebih tinggi.

Grafik rapat probabilitas $\psi_n^2(x)$ menunjukkan bahwa probabilitas selalu bernilai tidak negatif. Titik simpul pada ψ menjadi titik nol pada ψ^2 , sehingga partikel

tidak mungkin ditemukan pada titik simpul. Perbandingan antara ψ dan ψ^2 memperlihatkan bahwa fungsi gelombang tidak dapat ditafsirkan langsung sebagai probabilitas; probabilitas diperoleh dari kuadrat fungsi gelombang.

Simulasi perubahan panjang kotak menunjukkan bahwa energi keadaan dasar menurun ketika panjang kotak diperbesar. Hal ini sesuai dengan hubungan $E_1 \propto 1/L^2$. Secara kualitatif, hasil ini dapat dikaitkan dengan elektron π dalam molekul terkonjugasi: semakin panjang daerah delokalisasi, semakin kecil jarak tingkat energi. Namun, model partikel dalam kotak tetap merupakan pendekatan ideal yang tidak memasukkan seluruh kompleksitas molekul nyata.

Contoh ini tidak boleh disalin mentah tanpa data praktikum. Mahasiswa harus menyesuaikan dengan tabel dan grafik yang diperoleh.

16. Implikasi Pembelajaran dari Analisis

Analisis Praktikum 1 memiliki beberapa implikasi pembelajaran. Pertama, mahasiswa belajar bahwa hasil komputasi harus ditafsirkan berdasarkan teori. Tabel dan grafik tidak bermakna jika tidak dianalisis. Kedua, mahasiswa belajar membedakan fungsi gelombang dan rapat probabilitas. Ketiga, mahasiswa memahami hubungan antara bentuk fungsi gelombang, simpul, dan energi. Keempat, mahasiswa memahami bahwa ukuran sistem memengaruhi energi kuantum. Kelima, mahasiswa mulai menghubungkan model sederhana dengan fenomena kimia, terutama elektron π dalam sistem terkonjugasi.

Implikasi lain adalah pembentukan cara berpikir komputasional. Mahasiswa belajar membaca output secara kritis: apakah satuan benar, apakah rasio sesuai teori, apakah grafik masuk akal, apakah simpul sesuai n , apakah probabilitas tidak negatif. Cara berpikir ini akan sangat penting pada praktikum berikutnya. Ketika mahasiswa menganalisis optimasi geometri, mereka harus memeriksa konvergensi. Ketika menganalisis DFT, mereka harus memeriksa HOMO-LUMO. Ketika menganalisis IR, mereka harus memeriksa frekuensi imajiner dan intensitas. Praktikum 1 menjadi latihan awal membaca output secara ilmiah.

17. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Setelah analisis dilakukan, mahasiswa siap menjawab pertanyaan diskusi. Pertanyaan diskusi pada subbab berikutnya akan menguji pemahaman konseptual yang telah dibangun melalui output dan analisis. Pertanyaan seperti “Mengapa $n = 0$ tidak diperbolehkan?”, “Apa arti simpul dalam fungsi gelombang?”, “Mengapa energi meningkat ketika panjang kotak mengecil?”, dan “Bagaimana model ini membantu memahami elektron π ?” semuanya dapat dijawab jika mahasiswa telah menganalisis hasil dengan benar.

Dengan demikian, subbab 4.8 menjadi jembatan antara output kode dan refleksi konseptual. Output menunjukkan data. Analisis menjelaskan data. Pertanyaan diskusi menguji kedalaman pemahaman mahasiswa terhadap data dan teori.

4.9 Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 1 berfungsi sebagai alat refleksi konseptual setelah mahasiswa menghasilkan tabel energi, grafik fungsi gelombang ψ , grafik rapat probabilitas ψ^2 , grafik energi terhadap n , dan grafik pengaruh panjang kotak terhadap energi. Pada tahap ini, mahasiswa tidak lagi hanya diminta menjalankan kode, tetapi harus menunjukkan bahwa mereka mampu membaca output, menafsirkan hasil, menghubungkan grafik dengan teori, serta menjelaskan makna kimia kuantum dari model partikel dalam kotak.

Dalam praktikum komputasi, pertanyaan diskusi memiliki kedudukan yang sangat penting. Kode dapat berjalan, tabel dapat terbentuk, dan grafik dapat terlihat rapi, tetapi semua itu belum menjamin pemahaman. Mahasiswa dapat saja menghasilkan output yang benar secara teknis, namun belum memahami mengapa $n = 0$ tidak diperbolehkan, mengapa simpul berarti probabilitas nol, mengapa energi meningkat saat panjang kotak diperkecil, atau bagaimana model sederhana ini membantu memahami elektron π dalam molekul terkonjugasi. Oleh karena itu, pertanyaan diskusi menjadi jembatan antara **output komputasi** dan **pemahaman teoritis**.

Pertanyaan diskusi pada Praktikum 1 terdiri atas empat pertanyaan utama:

1. **Mengapa $n = 0$ tidak diperbolehkan?**
2. **Apa arti simpul dalam fungsi gelombang?**
3. **Mengapa energi meningkat ketika panjang kotak mengecil?**
4. **Bagaimana model ini membantu memahami elektron π ?**

Keempat pertanyaan tersebut harus dijawab berdasarkan teori, tabel hasil, grafik, dan analisis. Jawaban tidak boleh hanya berupa hafalan. Jawaban harus menunjukkan hubungan antara persamaan, visualisasi, dan makna fisik-kimia. Dengan demikian, pertanyaan diskusi bukan bagian tambahan di akhir praktikum, melainkan inti evaluasi pemahaman mahasiswa.

1. Mengapa $n = 0$ Tidak Diperbolehkan?

Pertanyaan pertama menguji pemahaman mahasiswa tentang bilangan kuantum dan makna keberadaan partikel dalam model kuantum. Dalam model partikel dalam kotak satu dimensi, nilai bilangan kuantum yang diperbolehkan adalah:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Nilai $n = 0$ tidak diperbolehkan karena menghasilkan fungsi gelombang nol di seluruh kotak. Fungsi gelombang partikel dalam kotak ditulis:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$$

Jika $n = 0$, maka:

$$\psi_0(x) = \sqrt{2/L} \sin(0) = 0$$

Artinya, fungsi gelombang bernilai nol untuk semua posisi x . Jika $\psi = 0$ di seluruh kotak, maka rapat probabilitas juga nol:

$$\psi_0^2(x) = 0$$

Konsekuensinya, peluang menemukan partikel di mana pun dalam kotak adalah nol. Keadaan seperti ini tidak merepresentasikan partikel yang benar-benar ada. Oleh karena itu, $n = 0$ bukan keadaan fisik yang diperbolehkan.

Dalam laporan, mahasiswa harus menjelaskan bahwa alasan $n = 0$ tidak diperbolehkan bukan sekadar karena “aturan rumus”, tetapi karena fungsi gelombangnya tidak dapat dinormalisasi sebagai keadaan partikel yang nyata. Total probabilitas menemukan partikel di dalam kotak harus sama dengan 1:

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Jika $\psi = 0$ di seluruh kotak, integral tersebut bernilai 0, bukan 1. Maka keadaan $n = 0$ gagal memenuhi syarat probabilitas.

Pertanyaan ini juga menguji pemahaman tentang energi keadaan dasar. Dalam mekanika klasik, partikel dalam kotak dapat dibayangkan diam sehingga energi kinetiknya nol. Namun, dalam mekanika kuantum, keadaan terendah adalah $n = 1$, bukan $n = 0$. Energi keadaan dasar adalah:

$$E_1 = h^2 / 8mL^2$$

Nilai ini lebih besar dari nol. Rujukan kimia kuantum menegaskan bahwa model kuantum partikel dalam kotak memiliki energi keadaan dasar yang tidak nol, berbeda dari gambaran klasik partikel diam dengan energi kinetik nol.

Jawaban yang baik untuk pertanyaan ini dapat dirumuskan sebagai berikut:

$n = 0$ tidak diperbolehkan karena menghasilkan fungsi gelombang $\psi_0(x) = 0$ di seluruh kotak. Jika fungsi gelombang nol di seluruh ruang, maka rapat probabilitas ψ^2 juga nol di seluruh ruang, sehingga probabilitas menemukan partikel di dalam kotak adalah nol. Keadaan tersebut tidak merepresentasikan partikel yang ada. Oleh karena itu, keadaan terendah yang diperbolehkan adalah $n = 1$, sehingga partikel dalam kotak memiliki energi keadaan dasar yang tidak nol.

Kesalahan umum yang harus dihindari adalah menjawab “ $n = 0$ tidak boleh karena energi menjadi nol.” Jawaban itu belum cukup. Masalah utamanya bukan hanya energi nol, tetapi fungsi gelombang nol di seluruh ruang, sehingga tidak ada keadaan fisik yang dapat dinormalisasi.

2. Apa Arti Simpul dalam Fungsi Gelombang?

Pertanyaan kedua menguji pemahaman mahasiswa tentang struktur fungsi gelombang dan makna probabilitas. Simpul adalah titik di dalam ruang tempat fungsi gelombang bernilai nol. Dalam model partikel dalam kotak, simpul internal adalah titik di antara $x = 0$ dan $x = L$ yang memenuhi:

$$\psi_n(x) = 0$$

Karena rapat probabilitas diberikan oleh:

$$\rho_n(x) = \psi_n^2(x)$$

maka pada simpul berlaku:

$$\psi_n^2(x) = 0$$

Artinya, simpul adalah titik dengan probabilitas nol. Partikel tidak mungkin ditemukan tepat pada titik simpul untuk keadaan kuantum tersebut.

Untuk partikel dalam kotak satu dimensi, jumlah simpul internal mengikuti hubungan:

$$\text{jumlah simpul internal} = n - 1$$

Maka:

n	Jumlah Simpul Internal	Makna
1	0	Keadaan dasar, tanpa simpul internal
2	1	Satu titik probabilitas nol di dalam kotak
3	2	Dua titik probabilitas nol di dalam kotak
4	3	Tiga titik probabilitas nol di dalam kotak
5	4	Empat titik probabilitas nol di dalam kotak

Rujukan kimia kuantum menjelaskan bahwa fungsi gelombang partikel dalam kotak memiliki simpul, dan setiap kenaikan n menambah jumlah simpul pada fungsi gelombang.

Makna simpul harus dijelaskan secara hati-hati. Simpul bukan sekadar titik potong grafik dengan sumbu x . Simpul adalah ciri keadaan kuantum yang memiliki konsekuensi fisik: probabilitas menemukan partikel di titik tersebut nol. Dalam grafik ψ , simpul terlihat sebagai titik tempat kurva melewati nol. Dalam grafik ψ^2 , simpul terlihat sebagai titik tempat rapat probabilitas menyentuh nol.

Simpul juga berkaitan dengan energi. Ketika n meningkat, jumlah simpul meningkat. Fungsi gelombang menjadi lebih berosilasi. Osilasi yang lebih cepat berarti fungsi gelombang memiliki kelengkungan lebih besar. Dalam persamaan Schrödinger, kelengkungan fungsi gelombang berkaitan dengan energi kinetik. Oleh karena itu, keadaan dengan lebih banyak simpul memiliki energi lebih tinggi.

Jawaban yang baik:

Simpul adalah titik di dalam kotak tempat fungsi gelombang bernilai nol. Karena rapat probabilitas diberikan oleh ψ^2 , maka pada titik simpul probabilitas menemukan partikel juga nol. Jumlah simpul internal untuk keadaan n adalah $n - 1$. Semakin besar n , semakin banyak simpul, fungsi gelombang semakin berosilasi, dan energi keadaan semakin tinggi.

Dalam kimia molekuler, konsep simpul sangat penting. Orbital antibonding memiliki simpul antara inti atom. Keberadaan simpul tersebut mengurangi kerapatan elektron di daerah ikatan. Karena itu, pemahaman simpul pada model partikel dalam kotak menjadi fondasi untuk memahami orbital molekul, HOMO, LUMO, ikatan, dan antiikatan pada bab-bab berikutnya.

Kesalahan umum yang harus dihindari adalah menulis bahwa simpul berarti “partikel berhenti di titik itu.” Pernyataan ini salah. Simpul bukan titik berhenti lintasan klasik. Simpul adalah titik probabilitas nol dalam deskripsi gelombang kuantum.

3. Mengapa Energi Meningkat Ketika Panjang Kotak Mengecil?

Pertanyaan ketiga menguji pemahaman mahasiswa tentang hubungan antara pembatasan ruang dan energi kuantum. Persamaan energi partikel dalam kotak adalah:

$$E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$$

Jika n dan m tetap, maka:

$$E_n \propto 1/L^2$$

Artinya, energi berbanding terbalik dengan kuadrat panjang kotak. Jika panjang kotak L diperkecil, energi meningkat. Jika panjang kotak L diperbesar, energi menurun.

Secara matematis, hubungan ini jelas karena L berada di penyebut dan berpangkat dua. Jika L menjadi setengah, energi menjadi empat kali lebih besar:

$$L \rightarrow L/2 \quad \text{maka} \quad E \rightarrow 4E$$

Jika L menjadi dua kali lebih besar, energi menjadi seperempat:

$$L \rightarrow 2L \quad \text{maka} \quad E \rightarrow E/4$$

Namun, mahasiswa tidak boleh berhenti pada penjelasan matematis. Mereka juga harus menjelaskan makna fisiknya. Ketika partikel dikurung dalam ruang yang lebih sempit, fungsi gelombang harus “muat” di dalam ruang yang lebih pendek. Akibatnya, fungsi gelombang harus berubah lebih tajam. Perubahan yang lebih tajam berkaitan dengan kelengkungan yang lebih besar. Dalam persamaan Schrödinger, kelengkungan fungsi gelombang berkaitan dengan energi kinetik. Karena itu, kotak yang lebih sempit menghasilkan energi yang lebih tinggi.

Secara konseptual, hal ini juga dapat dikaitkan dengan prinsip ketidakpastian. Jika posisi partikel semakin dibatasi, ketidakpastian posisi mengecil. Akibatnya, ketidakpastian momentum meningkat. Momentum yang lebih besar berkaitan dengan energi kinetik yang lebih besar. Model partikel dalam kotak memberikan ilustrasi sederhana tentang bagaimana pembatasan ruang dapat menaikkan energi kuantum.

Jawaban yang baik:

Energi meningkat ketika panjang kotak mengecil karena energi partikel dalam kotak berbanding terbalik dengan kuadrat panjang kotak, $E_n \propto 1/L^2$. Secara fisik, kotak yang lebih sempit membatasi ruang gerak partikel sehingga fungsi gelombang harus berubah lebih tajam. Kelengkungan fungsi gelombang yang lebih besar berkaitan dengan energi kinetik yang lebih tinggi. Oleh karena itu, semakin kecil L , semakin besar energi partikel.

Mahasiswa harus mengaitkan jawaban ini dengan grafik grafik_panjang_kotak_terhadap_energi.png. Grafik tersebut harus menunjukkan bahwa energi E_1 turun ketika L diperbesar. Jika grafik tidak menunjukkan pola tersebut, berarti ada kesalahan dalam satuan atau rumus.

Kesalahan umum pada pertanyaan ini adalah menjawab “karena ruang lebih sempit, partikel lebih sulit bergerak.” Jawaban ini belum cukup. Jawaban harus dikaitkan dengan persamaan $E \propto 1/L^2$, fungsi gelombang, dan kelengkungan energi kinetik.

4. Bagaimana Model Ini Membantu Memahami Elektron π ?

Pertanyaan keempat menghubungkan model partikel dalam kotak dengan kimia molekul, khususnya elektron π dalam sistem terkonjugasi. Pertanyaan ini penting karena menunjukkan bahwa model matematis sederhana dapat memberi intuisi kimia, meskipun tidak menggambarkan molekul nyata secara sempurna.

Dalam molekul terkonjugasi, elektron π tidak terlokalisasi hanya pada satu ikatan rangkap, tetapi dapat tersebar sepanjang sistem orbital p yang tumpang tindih. Contoh sederhana adalah etilena, butadiena, heksatriena, dan poliena yang lebih panjang. Semakin panjang sistem konjugasi, semakin luas daerah delokalisasi elektron π .

Model partikel dalam kotak membantu memahami gagasan ini dengan analogi berikut:

Model Partikel dalam Kotak	Sistem Elektron π
Partikel bergerak dalam kotak sepanjang L	Elektron π terdelokalisasi sepanjang sistem konjugasi
Panjang kotak L	Panjang efektif rantai konjugasi
Tingkat energi E_n	Tingkat energi elektronik sederhana
Selisih tingkat energi	Energi transisi elektronik

L lebih besar → jarak energi lebih kecil	Konjugasi lebih panjang → energi transisi lebih rendah

Jika panjang kotak L bertambah, jarak antar tingkat energi mengecil. Dalam molekul terkonjugasi, semakin panjang daerah delokalisasi elektron π , energi transisi elektronik cenderung lebih kecil secara kualitatif. Energi transisi yang lebih kecil berkaitan dengan panjang gelombang serapan yang lebih besar melalui hubungan:

$$\Delta E = hc/\lambda$$

Jika ΔE menurun, λ meningkat. Inilah alasan model partikel dalam kotak sering digunakan untuk memberi pemahaman awal tentang mengapa sistem konjugasi yang lebih panjang dapat menyerap cahaya pada panjang gelombang lebih besar. Rujukan kimia kuantum yang digunakan dalam pembahasan sebelumnya menjelaskan bahwa perluasan panjang konjugasi menurunkan jarak tingkat energi dan dapat menggeser absorpsi ke panjang gelombang yang lebih besar.

Namun, mahasiswa harus menjelaskan bahwa model ini hanya pendekatan kualitatif. Elektron π dalam molekul nyata tidak benar-benar berada dalam kotak ber dinding tak hingga. Molekul nyata memiliki inti atom, interaksi elektron-elektron, variasi panjang ikatan, geometri, dan efek lingkungan. Oleh karena itu, model partikel dalam kotak tidak menggantikan metode yang lebih realistis seperti metode Hückel, Hartree–Fock, DFT, atau perhitungan struktur elektronik lainnya.

Jawaban yang baik:

Model partikel dalam kotak membantu memahami elektron π karena elektron π dalam molekul terkonjugasi dapat dipandang secara sederhana sebagai partikel yang terdelokalisasi sepanjang rantai konjugasi. Semakin panjang sistem konjugasi, semakin besar panjang efektif kotak L . Karena energi berbanding terbalik dengan L^2 , jarak antar tingkat energi menjadi lebih kecil ketika sistem konjugasi lebih panjang. Hal ini membantu menjelaskan secara kualitatif mengapa molekul dengan konjugasi lebih panjang dapat menyerap cahaya pada energi lebih rendah atau panjang gelombang lebih besar. Namun, model ini tetap ideal dan tidak memuat seluruh kompleksitas molekul nyata.

Kesalahan umum pada pertanyaan ini adalah menyatakan bahwa “elektron π benar-benar bergerak dalam kotak.” Pernyataan itu terlalu literal. Yang benar, model kotak adalah analogi atau pendekatan konseptual. Ia membantu membangun intuisi, tetapi bukan gambaran lengkap molekul.

5. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik

Jawaban diskusi yang baik harus memenuhi beberapa kriteria:

Kriteria	Penjelasan
Berdasarkan teori	Jawaban mengacu pada persamaan dan konsep partikel dalam kotak
Berdasarkan output	Jawaban merujuk tabel energi, grafik ψ , grafik ψ^2 , atau grafik L

Memuat alasan	Jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi menjelaskan mengapa
Memakai satuan	Jika menyebut energi atau panjang, satuan harus jelas
Tidak berlebihan	Model tidak ditafsirkan melampaui batasnya
Mengaitkan konsep	Jawaban menghubungkan n , energi, simpul, probabilitas, dan L
Kritis	Jawaban menyebut keterbatasan model bila relevan

Jawaban yang kurang baik biasanya bersifat terlalu pendek, misalnya:

$n = 0$ tidak boleh karena rumusnya begitu.

Jawaban tersebut tidak menjelaskan fungsi gelombang dan probabilitas. Jawaban yang lebih baik harus menjelaskan bahwa $n = 0$ menghasilkan $\psi = 0$ di seluruh kotak sehingga tidak merepresentasikan partikel.

Contoh jawaban kurang baik untuk simpul:

Simpul adalah titik potong grafik.

Jawaban ini belum cukup. Simpul harus dijelaskan sebagai titik tempat fungsi gelombang bernilai nol dan rapat probabilitas juga nol.

Contoh jawaban kurang baik untuk elektron π :

Model ini menjelaskan elektron π karena elektron bergerak dalam kotak.

Jawaban ini terlalu literal. Jawaban yang benar harus menyatakan bahwa model ini merupakan analogi sederhana untuk delokalisasi elektron π .

6. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi

Dosen dapat menggunakan rubrik berikut untuk menilai jawaban mahasiswa.

Skor	Kriteria
4	Jawaban lengkap, benar secara teori, mengaitkan output praktikum, menggunakan istilah tepat, dan menyebut keterbatasan model jika relevan
3	Jawaban benar tetapi belum sepenuhnya mengaitkan teori dengan output
2	Jawaban sebagian benar tetapi masih ada kekurangan konsep atau kurang penjelasan
1	Jawaban sangat umum, hanya mengulang istilah, atau tidak menunjukkan pemahaman
0	Jawaban salah, kosong, atau tidak relevan

Contoh penerapan rubrik:

- Untuk pertanyaan $n = 0$, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan $\psi_0 = 0$, $\psi^2 = 0$, probabilitas total tidak dapat menjadi 1, dan keadaan dasar adalah $n = 1$.

- Untuk pertanyaan simpul, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan $\psi = 0$, $\psi^2 = 0$, jumlah simpul $n - 1$, dan hubungan simpul dengan energi.
- Untuk pertanyaan panjang kotak, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan $E \propto 1/L^2$, pembatasan ruang, kelengkungan fungsi gelombang, dan hasil grafik simulasi L .
- Untuk pertanyaan elektron π , skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan delokalisasi, analogi panjang kotak, penurunan jarak energi, hubungan dengan panjang gelombang, dan keterbatasan model.

Rubrik ini membantu menjaga penilaian tetap objektif dan berbasis pemahaman.

7. Pertanyaan Pengayaan untuk Diskusi Lanjutan

Selain empat pertanyaan utama, dosen dapat menambahkan pertanyaan pengayaan. Pertanyaan pengayaan tidak wajib, tetapi berguna untuk mahasiswa yang ingin memahami lebih dalam.

Beberapa pertanyaan pengayaan:

1. Mengapa grafik energi terhadap n tidak boleh ditafsirkan sebagai energi kontinu?
2. Apa perbedaan makna ψ dan ψ^2 dalam konteks probabilitas?
3. Bagaimana perubahan massa partikel memengaruhi energi?
4. Apa yang terjadi pada energi jika massa partikel diperbesar?
5. Mengapa partikel dalam kotak memiliki energi keadaan dasar yang tidak nol?
6. Mengapa keadaan dengan lebih banyak simpul memiliki energi lebih tinggi?
7. Bagaimana model partikel dalam kotak berbeda dari osilator harmonik?
8. Apa keterbatasan model partikel dalam kotak untuk menjelaskan spektrum molekul nyata?
9. Bagaimana hubungan $\Delta E = hc/\lambda$ membantu memahami serapan cahaya?
10. Mengapa sistem konjugasi panjang sering berkaitan dengan warna?

Pertanyaan-pertanyaan ini dapat digunakan untuk diskusi kelas, tugas refleksi, atau pengayaan laporan.

8. Contoh Jawaban Terpadu Pertanyaan Diskusi

Berikut contoh jawaban terpadu yang menunjukkan hubungan antara keempat pertanyaan:

Nilai $n = 0$ tidak diperbolehkan karena fungsi gelombang $\psi_0(x)$ menjadi nol di seluruh kotak. Jika fungsi gelombang nol di seluruh ruang, maka rapat probabilitas ψ^2 juga nol, sehingga partikel tidak memiliki peluang ditemukan di mana pun. Oleh karena itu, keadaan fisik terendah adalah $n = 1$, bukan $n = 0$.

Simpul adalah titik tempat fungsi gelombang bernilai nol. Pada titik simpul, rapat probabilitas juga nol karena $\psi^2 = 0$. Jumlah simpul internal pada model partikel dalam kotak adalah $n - 1$. Bertambahnya simpul menunjukkan bahwa fungsi gelombang semakin berosilasi dan keadaan tersebut memiliki energi lebih tinggi.

Energi meningkat ketika panjang kotak mengecil karena energi berbanding terbalik dengan kuadrat panjang kotak, $E_n \propto 1/L^2$. Kotak yang lebih sempit membatasi ruang partikel, sehingga fungsi gelombang harus berubah lebih tajam. Kelengkungan fungsi gelombang yang lebih besar berkaitan dengan energi kinetik yang lebih tinggi.

Model ini membantu memahami elektron π karena elektron π dalam sistem terkonjugasi dapat dipandang secara sederhana sebagai elektron yang terdelokalisasi sepanjang rantai. Semakin panjang rantai konjugasi, semakin besar panjang efektif kotak, sehingga jarak tingkat energi menjadi lebih kecil secara kualitatif. Hal ini membantu menjelaskan kecenderungan serapan cahaya pada panjang gelombang lebih besar untuk sistem konjugasi yang lebih panjang. Namun, model ini tetap ideal dan tidak menggantikan perhitungan struktur elektronik molekul nyata.

Contoh ini menunjukkan bahwa jawaban diskusi harus menghubungkan teori, grafik, dan interpretasi. Mahasiswa boleh menulis dengan gaya sendiri, tetapi substansi konseptualnya harus setara.

9. Kesalahan Konseptual yang Harus Dihindari

Dalam menjawab pertanyaan diskusi, mahasiswa perlu menghindari beberapa kesalahan konseptual berikut.

Kesalahan	Koreksi
$n = 0$ tidak boleh hanya karena rumus melarang	$n = 0$ menghasilkan $\psi = 0$ di seluruh kotak dan tidak dapat dinormalisasi sebagai keadaan partikel
Simpul hanya titik potong grafik	Simpul adalah titik $\psi = 0$ dan $\psi^2 = 0$, sehingga probabilitas nol
ψ negatif berarti probabilitas negatif	Probabilitas diberikan oleh ψ^2 , sehingga tidak negatif
Partikel bergerak mengikuti kurva ψ	ψ bukan lintasan, tetapi fungsi keadaan
Energi terhadap n kontinu	Energi hanya diperbolehkan pada n bilangan bulat positif
Kotak kecil menaikkan energi hanya karena “sempit”	Energi naik karena $E \propto 1/L^2$ dan fungsi gelombang memiliki kelengkungan lebih besar
Elektron π benar-benar berada dalam kotak ideal	Model kotak hanya analogi sederhana untuk delokalisasi elektron π
Model ini memprediksi spektrum molekul nyata secara presisi	Model ini bersifat kualitatif dan ideal

Kesalahan-kesalahan tersebut harus dibahas dalam kelas agar mahasiswa tidak membawa miskonsepsi ke praktikum berikutnya.

10. Implikasi Pembelajaran Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar menjelaskan hasil komputasi secara verbal dan argumentatif. Kedua, mahasiswa belajar menghubungkan persamaan dengan grafik. Ketiga, mahasiswa belajar membedakan hasil numerik dan interpretasi fisik. Keempat, mahasiswa belajar menilai batas model. Kelima, mahasiswa mulai melihat hubungan antara kimia kuantum dasar dan kimia molekul nyata.

Dalam konteks pendidikan kimia, pertanyaan diskusi juga melatih keterampilan berpikir tingkat tinggi. Mahasiswa tidak hanya mengingat rumus, tetapi menganalisis, mengevaluasi, dan mengaitkan konsep. Mereka harus menjelaskan mengapa suatu nilai diperbolehkan atau tidak, apa makna suatu titik pada grafik, bagaimana perubahan parameter memengaruhi hasil, dan bagaimana model sederhana memberi wawasan terhadap fenomena kimia.

Pertanyaan diskusi juga menjadi latihan komunikasi ilmiah. Mahasiswa harus menulis jawaban yang jelas, runtut, dan berbasis data. Mereka harus menghindari klaim yang terlalu luas. Mereka harus menyebut keterbatasan model. Ini adalah keterampilan penting untuk laporan praktikum, skripsi, artikel ilmiah, dan presentasi akademik.

11. Keterkaitan dengan Praktikum Berikutnya

Subbab 4.9 merupakan subbab terakhir dalam Bab 4. Setelah mahasiswa menjawab pertanyaan diskusi, mereka telah menyelesaikan satu siklus praktikum komputasi: memahami tujuan, mempelajari teori, memilih software, menjalankan kode, menghasilkan output, menganalisis hasil, dan merefleksikan konsep melalui pertanyaan diskusi.

Keterampilan yang diperoleh pada Bab 4 akan digunakan kembali pada Bab 5. Jika Bab 4 berfokus pada model kuantum sederhana yang dapat diselesaikan secara analitik, maka Bab 5 akan membawa mahasiswa menuju optimasi geometri molekul sederhana. Pada Bab 5, mahasiswa mulai berhadapan dengan struktur molekul, koordinat atom, panjang ikatan, sudut ikatan, dan hasil optimasi dari software kimia komputasi. Namun, pola berpikirnya tetap sama: hasil harus dihitung, divisualisasikan, divalidasi, dianalisis, dan dijelaskan.

Dengan demikian, pertanyaan diskusi pada Bab 4 tidak hanya menutup praktikum pertama, tetapi juga menyiapkan mahasiswa untuk praktikum berikutnya. Mahasiswa yang memahami n , energi, simpul, ψ , ψ^2 , dan panjang kotak akan lebih siap memahami struktur elektronik, orbital, geometri, dan sifat molekul pada bab-bab lanjutan.

Penutup Bab 4

Bab 4 telah membahas tahap awal praktikum komputasi molekul, yaitu bagaimana struktur molekul yang telah disiapkan pada bab sebelumnya digunakan sebagai input perhitungan. Jika Bab 3 menekankan representasi struktur molekul dalam bentuk koordinat dan file, maka Bab 4 mulai membawa struktur tersebut ke dalam lingkungan perhitungan kimia komputasi. Pada tahap ini,

mahasiswa tidak hanya melihat molekul sebagai objek visual, tetapi mulai memahami molekul sebagai sistem kuantum yang dapat dihitung energinya melalui software.

Gagasan utama Bab 4 adalah bahwa setiap praktikum kimia komputasi harus dimulai dengan alur kerja yang tertib: menyiapkan struktur, menentukan parameter sistem, memilih software, memilih metode perhitungan, menjalankan job, membaca output, dan menyimpan hasil secara sistematis. Alur kerja ini menjadi fondasi bagi praktikum-praktikum berikutnya yang lebih kompleks, seperti optimasi geometri, perhitungan Hartree–Fock, variasi basis set, DFT, orbital molekul, momen dipol, dan spektrum vibrasi.

Bab ini menegaskan bahwa perhitungan kimia komputasi tidak boleh dilakukan secara asal. Setiap input harus memuat informasi penting, seperti struktur molekul, muatan, multiplicity, jenis job, metode, dan parameter komputasi lain yang diperlukan. Kesalahan pada salah satu bagian input dapat menyebabkan perhitungan gagal, energi tidak wajar, atau interpretasi kimia yang keliru. Oleh karena itu, mahasiswa harus belajar membaca input dan output sebagai dokumen ilmiah, bukan sekadar file teknis.

Salah satu aspek penting dalam Bab 4 adalah pengenalan **single point energy** sebagai jenis perhitungan dasar. Single point energy menghitung energi molekul pada satu geometri tertentu tanpa mengubah posisi atom. Perhitungan ini sangat penting karena menjadi langkah awal untuk memahami hubungan antara struktur molekul dan energi. Melalui single point energy, mahasiswa dapat melihat bahwa satu struktur molekul memiliki energi tertentu dalam konteks metode dan parameter yang digunakan. Energi tersebut bukan angka bebas konteks, melainkan hasil dari model komputasi tertentu.

Bab ini juga menekankan pentingnya membaca output. Output software kimia komputasi umumnya memuat banyak informasi, seperti metode yang digunakan, basis set atau parameter perhitungan, status job, energi total, waktu komputasi, koordinat, pesan kesalahan, dan status konvergensi bila relevan. Mahasiswa harus mampu menemukan bagian penting dari output, terutama nilai energi, satuan energi, status keberhasilan perhitungan, dan informasi yang diperlukan untuk laporan.

Dalam konteks pembelajaran, Bab 4 melatih mahasiswa agar tidak hanya menjalankan software, tetapi juga memahami makna dari setiap langkah. ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, Avogadro, atau software lain hanyalah alat. Yang menjadi pusat pembelajaran adalah kemampuan mahasiswa menghubungkan struktur molekul, metode komputasi, output numerik, dan interpretasi kimia. Dengan demikian, Bab 4 membangun sikap ilmiah yang kritis dan tertib.

Bab ini juga memperkuat prinsip reproduibilitas. Setiap file input, file output, struktur awal, tabel data, dan catatan praktikum harus disimpan dengan nama yang jelas. Reproduibilitas tidak hanya penting dalam penelitian besar, tetapi juga dalam praktikum dasar. Jika mahasiswa tidak menyimpan output, tidak mencatat metode, atau tidak menuliskan parameter perhitungan, maka hasil praktikum sulit diperiksa kembali. Oleh karena itu, pengelolaan file dan dokumentasi menjadi bagian penting dari kompetensi kimia komputasi.

Secara metodologis, Bab 4 menjadi jembatan antara tahap persiapan dan tahap analisis yang lebih lanjut. Mahasiswa mulai belajar bahwa perhitungan molekul harus dilakukan secara bertahap. Struktur awal harus disiapkan terlebih dahulu, kemudian energi dapat dihitung, output dapat dibaca, dan hasil dapat dianalisis. Setelah mahasiswa memahami alur dasar ini, mereka akan lebih siap memasuki optimasi geometri pada bab berikutnya. Optimasi geometri memerlukan pemahaman yang lebih tinggi karena software tidak hanya menghitung energi, tetapi juga memperbarui posisi atom sampai mencapai struktur yang lebih stabil.

Dengan demikian, Bab 4 dapat disimpulkan sebagai bab pengantar praktikum operasional. Bab ini membentuk kebiasaan awal dalam menjalankan perhitungan kimia komputasi: teliti dalam input, cermat dalam memilih parameter, disiplin dalam menyimpan file, kritis dalam membaca output, dan hati-hati dalam menafsirkan energi. Kebiasaan ini akan menjadi dasar bagi seluruh praktikum kimia kuantum pada bab-bab selanjutnya.

Rangkuman Bab 4

1. **Bab 4 memperkenalkan alur awal praktikum komputasi molekul**, yaitu dari struktur molekul menuju perhitungan energi dan pembacaan output.
 2. **Struktur molekul yang telah disiapkan pada Bab 3 digunakan sebagai input perhitungan**, sehingga mahasiswa mulai memahami molekul sebagai objek komputasi.
 3. **Input perhitungan harus memuat informasi penting**, seperti geometri molekul, muatan, multiplicity, jenis job, metode, dan parameter komputasi lain.
 4. **Single point energy** merupakan perhitungan energi pada geometri tetap dan menjadi dasar untuk memahami hubungan antara struktur molekul dan energi.
 5. **Energi total tidak boleh dibaca tanpa konteks**, karena selalu bergantung pada metode, basis set atau parameter komputasi, geometri, dan status perhitungan.
 6. **Output software harus dibaca secara teliti**, terutama bagian energi, satuan, status job, waktu komputasi, dan pesan kesalahan.
 7. **ChemCompute dan software kimia komputasi lain berfungsi sebagai alat pembelajaran**, bukan pengganti pemahaman teori dan interpretasi kimia.
 8. **Reprodusibilitas menjadi prinsip penting**, sehingga input, output, catatan data, dan laporan harus disimpan serta diberi nama secara tertib.
 9. **Kesalahan input dapat menyebabkan hasil tidak valid**, sehingga mahasiswa perlu memeriksa struktur, muatan, multiplicity, dan parameter sebelum menjalankan perhitungan.
 10. **Bab 4 menjadi jembatan menuju optimasi geometri**, karena mahasiswa telah memahami dasar menjalankan job dan membaca output energi.
-

Implikasi Pembelajaran Bab 4

Bab 4 memiliki beberapa implikasi penting bagi pembelajaran praktikum kimia kuantum.

Pertama, mahasiswa mulai memahami bahwa software kimia komputasi bekerja berdasarkan input yang diberikan. Software tidak mengetahui maksud kimia pengguna jika input salah. Oleh karena itu, mahasiswa harus bertanggung jawab terhadap struktur, parameter, dan jenis job yang dipilih.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa energi molekul merupakan hasil perhitungan yang memiliki konteks. Nilai energi harus selalu disertai informasi metode, geometri, basis set atau parameter komputasi, dan software yang digunakan. Tanpa informasi tersebut, angka energi tidak dapat dievaluasi secara ilmiah.

Ketiga, mahasiswa dilatih membaca output sebagai bagian dari proses ilmiah. Output bukan sekadar hasil akhir, tetapi dokumen yang memuat jejak perhitungan. Dari output, mahasiswa dapat mengetahui apakah job berhasil, apakah energi diperoleh, apakah ada pesan kesalahan, dan apakah data layak dimasukkan dalam laporan.

Keempat, Bab 4 menanamkan kebiasaan kerja reproduibel. Mahasiswa belajar menyimpan input, output, dan catatan praktikum secara sistematis. Keterampilan ini sangat penting karena bab-bab selanjutnya akan menghasilkan lebih banyak file, grafik, tabel, dan analisis.

Kelima, Bab 4 memperkuat hubungan antara teori dan praktik. Mahasiswa tidak lagi hanya mempelajari struktur molekul secara visual, tetapi mulai mengaitkannya dengan energi dan output numerik. Hubungan inilah yang menjadi inti praktikum kimia kuantum berbasis komputasi.

Arah Menuju Bab 5

Setelah Bab 4 memperkenalkan alur dasar menjalankan perhitungan energi pada struktur molekul, Bab 5 dapat diarahkan pada **optimasi geometri**. Jika single point energy hanya menghitung energi pada geometri tetap, maka optimasi geometri memperbarui posisi atom secara bertahap untuk mencari struktur yang lebih stabil.

Dengan memahami Bab 4, mahasiswa telah memiliki bekal untuk memasuki Bab 5. Mereka sudah mengenal struktur input, jenis job, pembacaan output, penyimpanan file, dan pentingnya energi total. Pada Bab 5, pemahaman tersebut akan dikembangkan lebih lanjut untuk menjelaskan bagaimana software menggunakan energi dan gradien untuk memperbaiki geometri molekul.

Dengan demikian, Bab 4 menjadi fondasi operasional bagi praktikum optimasi geometri dan seluruh perhitungan struktur elektronik pada bab berikutnya.

Daftar Pustaka Bab 4

Allouche, A. R. (2011). Gabedit—A graphical user interface for computational chemistry softwares. *Journal of Computational Chemistry*, 32(1), 174–182.

Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular Quantum Mechanics* (5th ed.). Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Foresman, J. B., & Frisch, A. E. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Gordon, M. S., & Schmidt, M. W. (2005). Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later. In C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, & G. E. Scuseria (Eds.), *Theory and Applications of Computational Chemistry: The First Forty Years* (pp. 1167–1189). Elsevier.

Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4, 17.

Helgaker, T., Jørgensen, P., & Olsen, J. (2000). *Molecular Electronic-Structure Theory*. John Wiley & Sons.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Prentice Hall.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.

Lewars, E. G. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (3rd ed.). Springer.

McQuarrie, D. A., & Simon, J. D. (1997). *Physical Chemistry: A Molecular Approach*. University Science Books.

Murray-Rust, P., & Rzepa, H. S. (1999). Chemical Markup, XML, and the World Wide Web. 1. Basic principles. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 39(6), 928–942.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.

Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system—Version 5.0. *WIREs Computational Molecular Science*, 12(5), e1606.

Ochterski, J. W. (2000). *Thermochemistry in Gaussian*. Gaussian, Inc.

Ramachandran, K. I., Deepa, G., & Namboori, K. (2008). *Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications*. Springer.

Schmidt, M. W., Baldridge, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, J. H., Koseki, S., Matsunaga, N., Nguyen, K. A., Su, S. J., Windus, T. L., Dupuis, M., & Montgomery, J. A. (1993). General atomic and molecular electronic structure system. *Journal of Computational Chemistry*, 14(11), 1347–1363.

Sherrill, C. D. (2010). Frontiers in electronic structure theory. *The Journal of Chemical Physics*, 132(11), 110902.

Stewart, J. J. P. (1990). MOPAC: A semiempirical molecular orbital program. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 4, 1–103.

Sun, Q., Berkelbach, T. C., Blunt, N. S., Booth, G. H., Guo, S., Li, Z., Liu, J., McClain, J. D., Sayfutyarova, E. R., Sharma, S., Wouters, S., & Chan, G. K.-L. (2018). PySCF: The Python-based simulations of chemistry framework. *WIREs Computational Molecular Science*, 8(1), e1340.

Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications.

Young, D. C. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. John Wiley & Sons.

BAB 5

PRAKTIKUM 2: OPTIMASI GEOMETRI MOLEKUL SEDERHANA

Pengantar Bab 5

Bab 5 memasuki wilayah praktikum kimia komputasi yang lebih dekat dengan kerja nyata dalam kimia kuantum molekuler, yaitu **optimasi geometri molekul sederhana**. Jika Bab 4 membahas model partikel dalam kotak yang bersifat analitik, ideal, dan satu dimensi, maka Bab 5 mulai memperkenalkan molekul nyata sebagai sistem tiga dimensi yang memiliki atom, ikatan, sudut ikatan, energi total, dan bentuk kesetimbangan. Pada tahap ini, mahasiswa tidak hanya menghitung nilai energi dari rumus sederhana, tetapi mulai memahami bahwa struktur molekul yang tampak dalam gambar kimia harus dipandang sebagai hasil dari keseimbangan energi.

Optimasi geometri adalah proses mencari susunan atom yang menghasilkan energi paling rendah atau setidaknya energi stasioner pada suatu tingkat teori komputasi tertentu. Dalam kimia kuantum, molekul tidak cukup digambar secara manual lalu dianggap sebagai struktur benar. Struktur awal yang dibuat di Avogadro, ChemDraw 3D, editor molekul, atau antarmuka ChemCompute hanyalah tebakan awal. Tebakan tersebut harus dioptimasi karena panjang ikatan, sudut ikatan, dan orientasi atom yang dibuat secara manual belum tentu sesuai dengan geometri kesetimbangan. Dengan optimasi, software menghitung energi dan gradien energi, lalu mengubah posisi atom secara bertahap sampai kriteria konvergensi tercapai.

Secara konseptual, Bab 5 memperkenalkan mahasiswa pada gagasan **permukaan energi potensial**. Setiap susunan atom memiliki energi. Jika atom-atom digeser, energinya berubah. Optimasi geometri berarti mencari titik pada permukaan energi potensial yang memenuhi kondisi minimum lokal, yaitu titik tempat gaya bersih pada atom mendekati nol dan energi tidak lagi turun secara bermakna. Dalam bahasa komputasi, struktur dianggap konvergen jika perubahan energi, gradien, dan/atau perpindahan atom telah memenuhi ambang batas tertentu yang ditetapkan oleh software.

Bab ini penting karena hampir semua praktikum kimia komputasi berikutnya bergantung pada geometri yang benar. Energi total, HOMO-LUMO, momen dipol, frekuensi vibrasi, spektrum IR, dan energi reaksi semuanya sangat dipengaruhi oleh struktur molekul. Jika geometri awal salah dan tidak dioptimasi, maka hasil elektronik yang diperoleh juga dapat salah. Oleh karena itu, optimasi geometri adalah fondasi operasional untuk praktikum struktur elektronik.

Secara historis, optimasi geometri berkembang seiring perkembangan metode kimia kuantum dan kemampuan komputer menghitung energi molekul secara berulang. Pada masa awal kimia kuantum, perhitungan molekul sangat terbatas karena jumlah variabel koordinat atom banyak dan evaluasi energi mahal secara komputasi. Perkembangan algoritma optimasi, metode semiempirik, Hartree-Fock, DFT, serta perangkat lunak seperti GAMESS, Gaussian, ORCA, Psi4, dan platform

web seperti ChemCompute membuat optimasi geometri menjadi kegiatan rutin dalam pendidikan dan penelitian kimia komputasi. Dalam konteks praktikum sarjana, optimasi geometri molekul sederhana seperti H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 menjadi latihan awal yang sangat baik karena molekul-molekul tersebut memiliki struktur yang mudah dihubungkan dengan teori VSEPR, ikatan kimia, dan data literatur.

Bab 5 akan membahas urutan kerja praktikum secara bertahap. Subbab 5.1 menjelaskan tujuan praktikum. Subbab 5.2 membahas dasar teori optimasi geometri, termasuk permukaan energi potensial, gradien energi, titik minimum, dan geometri kesetimbangan. Subbab 5.3 membahas software yang digunakan, yaitu ChemCompute, Avogadro, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan Python. Subbab 5.4 menetapkan molekul model. Subbab 5.5 menjelaskan jalur ChemCompute. Subbab 5.6 membahas jalur Python mandiri untuk membaca koordinat XYZ, menghitung jarak, menghitung sudut, membuat tabel geometri, membuat plot struktur 3D, dan membandingkan geometri awal serta akhir. Subbab 5.7 menetapkan nama file kode. Subbab 5.8 menjelaskan output kode. Subbab 5.9 membahas analisis hasil optimasi. Subbab 5.10 memuat pertanyaan diskusi.

Dengan urutan tersebut, mahasiswa diarahkan dari pemahaman tujuan, dasar teori, perangkat lunak, molekul model, eksekusi optimasi, analisis geometri, sampai refleksi konseptual. Bab ini tidak hanya melatih keterampilan menjalankan software, tetapi juga membentuk kebiasaan membaca hasil optimasi secara kritis: apakah struktur konvergen, apakah panjang ikatan masuk akal, apakah sudut ikatan sesuai teori, apakah energi total turun, dan apakah geometri akhir dapat dipertanggungjawabkan.

5.1 Tujuan Praktikum

Tujuan Praktikum 2 adalah agar mahasiswa mampu **membangun struktur molekul, melakukan optimasi geometri, dan menganalisis panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, serta status konvergensi**. Tujuan ini mencakup empat ranah utama: keterampilan membangun model molekul, keterampilan menjalankan optimasi, keterampilan membaca parameter geometri, dan keterampilan menilai validitas hasil komputasi.

Secara umum, setelah menyelesaikan praktikum ini, mahasiswa diharapkan mampu:

1. Membangun struktur awal molekul sederhana.
2. Menjalankan optimasi geometri menggunakan jalur ChemCompute atau software kimia komputasi yang tersedia.
3. Mengunduh dan menyimpan file output hasil optimasi.
4. Membaca koordinat awal dan koordinat akhir.
5. Menghitung panjang ikatan dari koordinat XYZ.
6. Menghitung sudut ikatan dari koordinat XYZ.
7. Membandingkan geometri awal dan geometri akhir.
8. Membaca energi total sebelum dan sesudah optimasi.
9. Menentukan apakah optimasi telah mencapai konvergensi.
10. Menafsirkan hasil optimasi berdasarkan teori VSEPR dan data literatur.

Tujuan-tujuan tersebut harus dipahami sebagai satu kesatuan. Mahasiswa tidak cukup hanya membuat struktur molekul yang tampak bagus. Struktur tersebut harus dioptimasi. Mahasiswa tidak cukup hanya menjalankan optimasi. Mereka harus memeriksa apakah optimasi konvergen. Mahasiswa tidak cukup hanya melihat gambar molekul akhir. Mereka harus menghitung panjang ikatan dan sudut ikatan. Mahasiswa tidak cukup hanya memiliki angka panjang ikatan dan sudut ikatan. Mereka harus menafsirkan apakah nilai tersebut masuk akal berdasarkan teori kimia dan literatur.

1. Membangun Struktur Molekul Awal

Tujuan pertama adalah membangun struktur molekul awal. Struktur awal adalah susunan koordinat atom sebelum optimasi dilakukan. Struktur ini dapat dibuat menggunakan Avogadro, editor molekul pada ChemCompute, atau software visualisasi molekul lain. Pada praktikum ini, molekul model yang digunakan adalah H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 . Molekul-molekul ini dipilih karena sederhana, memiliki struktur yang dikenal, dan mudah dianalisis dengan teori VSEPR.

Membangun struktur molekul awal bukan kegiatan menggambar biasa. Setiap atom yang diletakkan dalam ruang tiga dimensi akan menjadi input bagi perhitungan energi. Jika struktur awal terlalu buruk, optimasi dapat gagal, konvergensi menjadi lambat, atau hasil akhir masuk ke minimum yang tidak diharapkan. Misalnya, jika dua atom hidrogen dalam H_2 diletakkan terlalu dekat, energi awal sangat tinggi karena tolakan inti sangat besar. Jika diletakkan terlalu jauh, software harus melakukan banyak langkah untuk menemukan jarak kesetimbangan. Jika struktur H_2O dibuat hampir linear, optimasi tetap mungkin memperbaikinya, tetapi mahasiswa harus memahami bahwa struktur awal tersebut bukan representasi geometri kesetimbangan air.

Tujuan membangun struktur awal adalah melatih mahasiswa memahami bahwa molekul adalah objek tiga dimensi. Rumus molekul H_2O hanya memberi tahu jumlah atom, tetapi tidak memberi tahu bentuk geometri. Struktur air memiliki dua ikatan O–H dan sudut H–O–H tertentu. Amonia memiliki bentuk trigonal piramida. Metana memiliki bentuk tetrahedral. Karbon dioksida memiliki bentuk linear. Dengan membangun struktur awal, mahasiswa mulai menghubungkan rumus molekul dengan geometri spasial.

Dalam laporan, mahasiswa harus mencatat bagaimana struktur awal dibuat. Misalnya:

Struktur awal H_2O dibuat menggunakan Avogadro dengan atom O sebagai atom pusat dan dua atom H terikat pada atom O. Struktur awal kemudian disimpan dalam format XYZ dan digunakan sebagai input optimasi geometri.

Catatan ini penting karena struktur awal merupakan bagian dari reproduktibilitas. Hasil optimasi tidak dapat diperiksa dengan baik jika struktur awal tidak tersedia.

2. Melakukan Optimasi Geometri

Tujuan kedua adalah menjalankan optimasi geometri. Optimasi geometri adalah proses komputasi untuk mencari susunan atom yang memiliki energi lebih rendah dibandingkan struktur awal, sampai tercapai kriteria konvergensi. Dalam proses ini, software menghitung energi molekul dan gradien energi terhadap koordinat atom. Berdasarkan gradien tersebut, posisi atom diperbarui

secara bertahap. Proses ini diulang sampai perubahan energi, gaya, dan perpindahan atom cukup kecil.

Secara sederhana, optimasi dapat dibayangkan seperti mencari posisi lembah pada permukaan energi. Struktur awal adalah titik awal di permukaan tersebut. Jika energi masih dapat diturunkan dengan menggeser atom, software akan menggeser atom. Jika tidak ada arah penurunan energi yang signifikan, struktur dianggap mendekati minimum.

Tujuan praktikum bukan sekadar “menekan tombol optimize”. Mahasiswa harus memahami bahwa optimasi memiliki logika ilmiah. Setiap langkah optimasi berusaha menurunkan energi atau memenuhi kriteria tertentu. Struktur akhir disebut geometri teroptimasi hanya jika optimasi berhasil dan statusnya konvergen. Jika output menunjukkan tidak konvergen, maka geometri akhir belum boleh langsung dianggap sebagai geometri kesetimbangan.

Rujukan yang digunakan dalam penyusunan buku ini menekankan bahwa optimasi geometri perlu dilengkapi pengecekan, termasuk pelaporan metode, basis set, model pelarut jika digunakan, serta file output agar hasil dapat direplikasi. Dengan demikian, tujuan praktikum ini tidak hanya menghasilkan gambar molekul akhir, tetapi membangun prosedur yang dapat diperiksa ulang.

3. Menganalisis Panjang Ikatan

Tujuan ketiga adalah menganalisis panjang ikatan. Panjang ikatan adalah jarak antara dua atom yang berikatan dalam molekul. Dalam koordinat Cartesian, panjang ikatan antara atom A dan atom B dihitung dari jarak Euclidean:

$$d_{AB} = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2 + (z_B - z_A)^2}$$

Dalam praktikum ini, mahasiswa harus mampu menghitung panjang ikatan dari koordinat XYZ, bukan hanya membacanya dari tampilan visual. Hal ini penting karena gambar molekul dapat menipu. Molekul yang tampak rapi belum tentu memiliki panjang ikatan yang masuk akal. Nilai numerik panjang ikatan diperlukan untuk analisis ilmiah.

Contoh panjang ikatan yang dianalisis:

Molekul	Parameter
H ₂	H–H
H ₂ O	O–H
NH ₃	N–H
CH ₄	C–H
CO ₂	C=O

Mahasiswa harus membandingkan panjang ikatan awal dan akhir. Misalnya, jika struktur awal H₂ memiliki jarak H–H 1,20 Å dan setelah optimasi menjadi sekitar 0,74 Å pada metode tertentu, maka mahasiswa dapat menjelaskan bahwa optimasi mengubah struktur menuju jarak ikatan yang lebih stabil. Nilai tepat dapat berbeda tergantung metode dan basis set, sehingga mahasiswa harus berhati-hati dalam membandingkan hasil.

Analisis panjang ikatan juga mengajarkan bahwa geometri molekul adalah hasil keseimbangan gaya tarik dan tolak. Jika atom terlalu dekat, tolakan inti dan tolakan elektron meningkat. Jika atom terlalu jauh, interaksi ikatan melemah. Geometri kesetimbangan berada pada jarak yang menyeimbangkan kedua kecenderungan tersebut.

4. Menganalisis Sudut Ikatan

Tujuan keempat adalah menganalisis sudut ikatan. Sudut ikatan adalah sudut yang dibentuk oleh tiga atom, misalnya H–O–H pada air, H–N–H pada amonia, dan H–C–H pada metana. Sudut ikatan memberi informasi tentang bentuk molekul. Dalam koordinat Cartesian, sudut A–B–C dengan B sebagai atom pusat dihitung menggunakan vektor BA dan BC:

$$\cos \theta = (\mathbf{BA} \cdot \mathbf{BC}) / (|\mathbf{BA}| |\mathbf{BC}|)$$

Kemudian:

$$\theta = \arccos[(\mathbf{BA} \cdot \mathbf{BC}) / (|\mathbf{BA}| |\mathbf{BC}|)]$$

Mahasiswa harus mampu menghitung sudut dari koordinat, karena output optimasi biasanya memuat koordinat atom, sedangkan sudut ikatan perlu dihitung atau dianalisis dari struktur tersebut. Python dapat digunakan untuk menghitung sudut secara sistematis.

Sudut ikatan penting karena berkaitan dengan teori VSEPR. Misalnya:

Molekul	Bentuk Ideal/Kualitatif	Parameter Sudut
H ₂ O	Bengkok	H–O–H
NH ₃	Trigonal piramida	H–N–H
CH ₄	Tetrahedral	H–C–H
CO ₂	Linear	O–C–O

H₂O tidak linear karena atom O memiliki pasangan elektron bebas. NH₃ berbentuk trigonal piramida karena atom N memiliki satu pasangan elektron bebas. CH₄ berbentuk tetrahedral karena empat pasangan ikatan tersusun simetris. CO₂ linear karena dua daerah kerapatan elektron di sekitar atom C tersusun berlawanan arah. Dengan demikian, analisis sudut ikatan menghubungkan hasil optimasi dengan teori struktur molekul.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa hasil optimasi tidak selalu identik persis dengan nilai ideal VSEPR. Misalnya, sudut tetrahedral ideal adalah sekitar 109,5°, tetapi hasil komputasi dapat sedikit berbeda bergantung metode, basis set, dan detail perhitungan. Teori VSEPR memberi prediksi kualitatif, sedangkan optimasi geometri memberi hasil kuantitatif pada tingkat teori tertentu.

5. Menganalisis Energi Total

Tujuan kelima adalah menganalisis energi total. Energi total dalam output kimia kuantum biasanya dinyatakan dalam Hartree untuk perhitungan elektronik. Energi total menggambarkan energi

sistem pada geometri tertentu dalam tingkat teori yang digunakan. Dalam optimasi geometri, energi total biasanya berubah dari langkah ke langkah sampai mencapai nilai yang stabil.

Mahasiswa harus memahami bahwa energi total absolut tidak selalu mudah ditafsirkan secara langsung. Nilai energi total molekul seperti -76 Hartree atau -40 Hartree bukan angka yang berdiri sendiri untuk dibandingkan sembarangan antar molekul berbeda. Namun, perubahan energi selama optimasi sangat penting. Jika energi turun dari struktur awal ke struktur akhir, optimasi bergerak menuju struktur yang lebih stabil pada tingkat teori tersebut.

Tujuan praktikum ini bukan menilai stabilitas semua molekul berdasarkan energi total absolut, tetapi memahami bahwa optimasi mencari geometri dengan energi lebih rendah. Mahasiswa harus mencatat energi awal dan energi akhir jika tersedia, lalu menjelaskan perubahan energi. Jika output hanya memberi energi akhir, mahasiswa tetap harus melaporkan energi total akhir beserta metode dan basis set yang digunakan.

Dalam laporan, energi total harus disertai satuan dan tingkat teori. Contoh:

Energi total akhir H_2O pada metode HF/STO-3G adalah ... Hartree. Nilai ini diperoleh setelah optimasi geometri mencapai konvergensi.

Pernyataan seperti ini lebih baik daripada hanya menulis “energi = ...” tanpa konteks.

6. Memahami Status Konvergensi

Tujuan keenam adalah memahami status konvergensi. Konvergensi berarti proses optimasi telah memenuhi kriteria penghentian yang ditetapkan oleh software. Kriteria tersebut dapat mencakup perubahan energi yang kecil, gradien maksimum yang kecil, gradien RMS yang kecil, perpindahan atom maksimum yang kecil, atau perpindahan RMS yang kecil. Setiap software memiliki format pelaporan yang berbeda, tetapi prinsipnya sama: optimasi dianggap selesai jika struktur tidak lagi berubah signifikan dan gaya pada atom cukup kecil.

Status konvergensi sangat penting karena struktur yang tidak konvergen belum boleh dianggap sebagai geometri kesetimbangan. Jika optimasi berhenti karena jumlah iterasi maksimum tercapai, error numerik, atau masalah input, maka hasil akhir harus ditafsirkan dengan hati-hati. Mahasiswa harus memeriksa output, bukan hanya melihat bahwa file hasil terbentuk.

Dalam dokumen rujukan praktikum yang digunakan, validasi hasil komputasi menekankan perlunya memeriksa status konvergensi, output, dan interpretasi, bukan hanya melaporkan angka. Hal ini sangat relevan untuk Bab 5 karena optimasi geometri yang gagal konvergen dapat menghasilkan panjang ikatan dan sudut ikatan yang tampak numerik tetapi tidak sah secara ilmiah.

Mahasiswa harus mampu membedakan:

Status	Makna
Konvergen	Optimasi memenuhi kriteria; geometri akhir dapat dianalisis

Tidak konvergen	Optimasi belum memenuhi kriteria; hasil perlu diperbaiki atau diulang
Error input	File input salah; perhitungan tidak sah
Max iterations reached	Batas iterasi tercapai; struktur akhir belum tentu minimum
Imaginary frequency setelah optimasi minimum	Struktur mungkin bukan minimum sejati

Pada praktikum dasar ini, pengecekan frekuensi mungkin belum selalu dilakukan, tetapi mahasiswa perlu dikenalkan bahwa optimasi geometri idealnya dilanjutkan dengan pengecekan frekuensi untuk memastikan bahwa struktur benar-benar minimum, bukan titik pelana. Rujukan yang digunakan menegaskan bahwa optimasi geometri perlu disertai pengecekan frekuensi: semua frekuensi nyata untuk minimum, dan satu frekuensi imajiner untuk keadaan transisi orde pertama.

7. Menghubungkan Optimasi dengan Teori VSEPR

Tujuan ketujuh adalah menghubungkan hasil optimasi dengan teori VSEPR. VSEPR menjelaskan bentuk molekul berdasarkan tolakan pasangan elektron di sekitar atom pusat. Teori ini bersifat kualitatif tetapi sangat berguna untuk memprediksi bentuk molekul sederhana. Dalam praktikum ini, VSEPR digunakan sebagai pembanding konseptual terhadap hasil optimasi.

Contoh hubungan:

- H_2 tidak memiliki atom pusat dan hanya memiliki satu ikatan; hasil optimasi berupa jarak H–H.
- H_2O diprediksi bengkok karena dua pasangan ikatan dan dua pasangan bebas pada O.
- NH_3 diprediksi trigonal piramida karena tiga pasangan ikatan dan satu pasangan bebas pada N.
- CH_4 diprediksi tetrahedral karena empat pasangan ikatan pada C.
- CO_2 diprediksi linear karena dua daerah elektron di sekitar C.

Optimasi geometri memberi nilai numerik panjang ikatan dan sudut ikatan. VSEPR memberi kerangka kualitatif untuk menafsirkan bentuk. Dengan menggabungkan keduanya, mahasiswa memahami bahwa teori kimia dan komputasi saling melengkapi. Komputasi tidak menggantikan teori dasar; komputasi memberi angka dan visualisasi untuk memperdalam teori.

Namun, mahasiswa harus kritis. Jika hasil optimasi menyimpang dari prediksi VSEPR, penyebabnya harus diperiksa. Apakah struktur awal salah? Apakah optimasi tidak konvergen? Apakah metode terlalu sederhana? Apakah molekul dianalisis dengan salah? Apakah koordinat atom tertukar? Analisis kritis ini penting agar mahasiswa tidak menerima output software secara buta.

8. Mengembangkan Keterampilan Membaca File Output

Tujuan kedelapan adalah mengembangkan keterampilan membaca file output. File output kimia komputasi biasanya panjang dan berisi banyak informasi: input, metode, basis set, muatan,

multiplicity, energi, iterasi SCF, langkah optimasi, koordinat, gradien, status konvergensi, dan pesan akhir. Mahasiswa pemula sering hanya mencari angka energi atau struktur akhir, padahal informasi penting lain tersebar dalam output.

Dalam praktikum ini, mahasiswa harus mulai belajar menemukan bagian-bagian utama output:

1. Metode komputasi yang digunakan.
2. Basis set yang digunakan.
3. Muatan molekul.
4. Multiplicity.
5. Energi total akhir.
6. Koordinat geometri akhir.
7. Status konvergensi.
8. Pesan error jika ada.

Kemampuan membaca output adalah keterampilan inti kimia komputasi. Software yang berbeda memiliki format output berbeda, tetapi prinsip membacanya sama. Mahasiswa harus mengetahui bahwa output bukan sekadar lampiran, melainkan sumber data utama untuk analisis.

9. Menggunakan Python untuk Analisis Geometri

Tujuan kesembilan adalah menggunakan Python untuk menganalisis geometri. Setelah koordinat awal dan akhir tersedia dalam format XYZ, Python digunakan untuk membaca koordinat, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membuat tabel, membuat plot struktur 3D sederhana, dan membandingkan geometri awal serta akhir. Hal ini penting karena analisis geometri tidak boleh bergantung sepenuhnya pada tampilan visual software.

Python membantu mahasiswa melakukan analisis yang transparan. Rumus jarak dan sudut dapat ditulis jelas. Koordinat dapat dibaca dari file. Tabel dapat diekspor ke CSV. Gambar struktur dapat disimpan. Perbandingan geometri awal dan akhir dapat dibuat secara sistematis. Ini memperkuat prinsip Bab 3 bahwa kode harus dapat dijalankan ulang dan menghasilkan output yang dapat digunakan dalam laporan.

Dengan Python, mahasiswa juga dapat memeriksa hasil dari berbagai software. Misalnya, koordinat akhir dari GAMESS, ORCA, Gaussian, atau Psi4 dapat dikonversi ke XYZ, lalu dianalisis dengan script yang sama. Ini membuat Python berperan sebagai alat netral untuk analisis pascaproses.

10. Molekul Model sebagai Sarana Bertahap

Tujuan praktikum juga mencakup pemilihan molekul model yang tepat. H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 tidak dipilih secara acak. Molekul-molekul ini membentuk urutan pedagogis.

H_2 adalah molekul paling sederhana untuk memahami panjang ikatan. H_2O memperkenalkan sudut ikatan dan pasangan elektron bebas. NH_3 memperkenalkan bentuk trigonal piramida. CH_4 memperkenalkan geometri tetrahedral. CO_2 memperkenalkan geometri linear dan ikatan rangkap.

Dengan lima molekul ini, mahasiswa memperoleh gambaran dasar tentang variasi bentuk molekul sederhana.

Tabel tujuan berdasarkan molekul:

Molekul	Tujuan Utama
H ₂	Memahami optimasi jarak ikatan
H ₂ O	Memahami sudut ikatan bengkok
NH ₃	Memahami bentuk trigonal piramida
CH ₄	Memahami bentuk tetrahedral
CO ₂	Memahami bentuk linear

Molekul sederhana juga mengurangi risiko teknis. Perhitungan lebih cepat, output lebih pendek, dan hasil lebih mudah diperiksa. Ini sesuai untuk praktikum awal optimasi geometri.

11. Tujuan Operasional Praktikum

Secara operasional, mahasiswa harus menghasilkan beberapa produk praktikum. Produk tersebut meliputi:

1. Struktur awal molekul.
2. File input optimasi.
3. File output optimasi.
4. Koordinat akhir teroptimasi.
5. Tabel panjang ikatan.
6. Tabel sudut ikatan.
7. Gambar struktur 3D sederhana.
8. Tabel perbandingan geometri awal dan akhir.
9. File CSV hasil analisis geometri.
10. Laporan analisis.

Tujuan operasional ini memastikan bahwa praktikum tidak berhenti pada perhitungan. Mahasiswa harus menghasilkan data yang dapat dipakai dalam laporan. Pada subbab 5.8 nanti, output kode akan dirinci lebih lanjut. Pada subbab 5.9, hasil tersebut akan dianalisis berdasarkan VSEPR dan data literatur.

12. Indikator Keberhasilan Praktikum

Agar tujuan praktikum dapat dinilai, indikator keberhasilan harus jelas. Mahasiswa dianggap berhasil jika:

1. Struktur awal molekul dapat dibuat dengan benar.
2. Optimasi geometri berhasil dijalankan.
3. File output dapat diunduh dan disimpan.
4. Status konvergensi dapat ditemukan dalam output.
5. Koordinat akhir dapat dibaca.

6. Panjang ikatan dapat dihitung dari koordinat.
7. Sudut ikatan dapat dihitung dari koordinat.
8. Geometri akhir dapat dibandingkan dengan struktur awal.
9. Hasil dapat dibandingkan dengan teori VSEPR.
10. Laporan memuat interpretasi, bukan hanya tabel.

Indikator ini menekankan bahwa praktikum bukan hanya berhasil jika software selesai berjalan. Praktikum berhasil jika mahasiswa memahami dan mampu menganalisis hasil.

13. Analisis Kritis terhadap Tujuan Praktikum

Tujuan Praktikum 2 perlu dipahami secara kritis. Optimasi geometri bukan proses yang selalu menghasilkan “struktur benar mutlak”. Hasil optimasi bergantung pada metode, basis set, model, parameter, dan struktur awal. Geometri hasil HF/STO-3G dapat berbeda dari hasil B3LYP/6-31G(d), dan keduanya dapat berbeda dari data eksperimen. Hal ini bukan berarti salah, tetapi menunjukkan bahwa setiap metode memiliki pendekatan dan keterbatasan.

Mahasiswa harus belajar bahwa kata “optimal” selalu relatif terhadap tingkat teori yang digunakan. Struktur yang teroptimasi pada metode tertentu adalah minimum menurut model energi metode tersebut, bukan kebenaran absolut. Karena itu, laporan harus selalu menyebut metode dan basis set. Jika metode tidak disebut, hasil geometri kehilangan konteks ilmiah.

Tujuan praktikum ini juga tidak boleh disalahpahami sebagai pembuktian bahwa software selalu benar. Software menghitung berdasarkan input dan metode yang diberikan. Jika input salah, metode tidak cocok, atau optimasi tidak konvergen, output dapat menyesatkan. Oleh karena itu, mahasiswa harus mengembangkan sikap kritis: memeriksa output, mengecek konvergensi, membandingkan dengan teori, dan mempertanyakan hasil yang tidak masuk akal.

14. Implikasi Pembelajaran

Praktikum optimasi geometri memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar bahwa bentuk molekul dapat dihitung, bukan hanya digambar. Kedua, mahasiswa belajar bahwa stabilitas struktur berkaitan dengan energi minimum. Ketiga, mahasiswa belajar membaca output software kimia komputasi. Keempat, mahasiswa belajar menggunakan Python untuk analisis geometri. Kelima, mahasiswa belajar membandingkan hasil komputasi dengan teori VSEPR dan literatur.

Implikasi lain adalah penguatan pemahaman struktur molekul. Dalam pembelajaran kimia dasar, mahasiswa sering menghafal bentuk molekul: linear, bengkok, trigonal piramida, tetrahedral. Dalam praktikum ini, bentuk tersebut diperiksa melalui koordinat, jarak, sudut, dan energi. Dengan demikian, geometri molekul tidak lagi hanya menjadi gambar dua dimensi di buku teks, tetapi menjadi objek komputasi tiga dimensi yang dapat dianalisis secara kuantitatif.

Praktikum ini juga menjadi persiapan penting untuk Bab 6 dan Bab 7. Hartree–Fock, basis set, DFT, HOMO-LUMO, momen dipol, dan spektrum IR semuanya bergantung pada geometri. Jika

mahasiswa memahami optimasi geometri, mereka akan lebih siap memahami mengapa perhitungan elektronik harus dilakukan pada struktur yang benar.

15. Transisi ke Dasar Teori

Setelah tujuan praktikum dipahami, subbab berikutnya akan membahas dasar teori optimasi geometri. Pembahasan akan mencakup permukaan energi potensial, gradien energi, titik minimum, dan geometri kesetimbangan. Dasar teori ini penting karena mahasiswa perlu memahami apa yang sebenarnya dicari oleh software ketika menjalankan optimasi.

Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap membaca teori. Mereka mengetahui bahwa optimasi bukan sekadar membuat molekul tampak rapi, tetapi mencari struktur dengan energi minimum yang memenuhi kriteria konvergensi. Mereka juga memahami bahwa panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, dan status konvergensi adalah indikator utama yang harus dianalisis.

5.2 Dasar Teori

Dasar teori optimasi geometri molekul bertumpu pada gagasan bahwa **struktur molekul yang stabil adalah susunan atom yang berada pada titik energi rendah pada permukaan energi potensial**. Molekul tidak hanya dipahami sebagai kumpulan atom yang dihubungkan oleh garis ikatan, tetapi sebagai sistem fisik yang memiliki energi bergantung pada posisi inti atom dan distribusi elektronnya. Ketika posisi atom berubah, energi molekul juga berubah. Optimasi geometri adalah prosedur komputasi untuk mencari susunan atom yang memenuhi kriteria energi minimum atau titik stasioner pada tingkat teori tertentu.

Dalam praktikum ini, mahasiswa perlu memahami empat konsep utama:

1. **Permukaan energi potensial** sebagai lanskap energi molekul.
2. **Gradien energi** sebagai penunjuk arah perubahan energi terhadap koordinat atom.
3. **Titik minimum** sebagai struktur stabil lokal.
4. **Geometri kesetimbangan** sebagai susunan atom yang telah memenuhi kriteria stabilitas menurut metode komputasi yang digunakan.

Keempat konsep tersebut saling terkait. Permukaan energi potensial menggambarkan bagaimana energi berubah ketika atom bergeser. Gradien menunjukkan arah dan besar perubahan energi. Optimasi menggunakan informasi gradien untuk menggeser atom menuju energi yang lebih rendah. Jika gradien sudah mendekati nol dan kriteria konvergensi terpenuhi, struktur dianggap mencapai titik stasioner. Jika titik stasioner tersebut merupakan minimum, maka struktur tersebut disebut geometri kesetimbangan atau geometri teroptimasi.

Optimasi geometri merupakan prosedur dasar dalam kimia komputasi karena hampir semua analisis lanjutan membutuhkan struktur molekul yang masuk akal secara energi. Sebelum energi relatif dibandingkan, orbital divisualisasikan, frekuensi vibrasi dihitung, spektrum diprediksi, atau sifat molekul ditafsirkan, struktur molekul harus berada pada geometri yang wajar menurut metode yang digunakan. Struktur yang baru digambar biasanya belum tentu stabil: panjang ikatan dapat

terlalu pendek atau terlalu panjang, sudut ikatan dapat tidak realistis, atom dapat saling bertabrakan, dan orientasi gugus dapat tidak masuk akal. Optimasi geometri bertujuan memperbaiki kondisi tersebut melalui proses pencarian struktur dengan energi lebih rendah.

1. Definisi Optimasi Geometri

Optimasi geometri adalah proses komputasi untuk mengubah koordinat atom dalam molekul secara bertahap sehingga energi sistem menurun dan struktur mencapai titik minimum lokal pada permukaan energi potensial. Dalam proses ini, software menghitung energi molekul, menghitung gradien energi terhadap koordinat atom, menentukan arah perpindahan atom, lalu memperbarui struktur. Proses tersebut dilakukan berulang sampai perubahan energi, gaya, dan perpindahan atom memenuhi kriteria konvergensi.

Secara sederhana, optimasi geometri dapat dipahami sebagai proses mencari bentuk molekul yang paling “nyaman” secara energi. Jika struktur awal terlalu tegang, atom-atom akan digeser. Jika panjang ikatan terlalu pendek, tolakan meningkat dan energi tinggi. Jika panjang ikatan terlalu panjang, interaksi ikatan melemah. Jika sudut ikatan tidak sesuai, distribusi elektron dan tolakan pasangan elektron tidak seimbang. Optimasi mengubah susunan atom agar energi menjadi lebih rendah.

Namun, definisi tersebut harus dipahami secara ilmiah. Struktur hasil optimasi bukan “struktur benar mutlak”, melainkan struktur yang optimum menurut **model, metode, basis set, muatan, multiplicity, dan parameter komputasi** yang digunakan. Optimasi dengan mekanika molekular, semiempiris, Hartree–Fock, DFT, DFTB, atau xTB dapat menghasilkan geometri yang berbeda dalam tingkat tertentu. Karena itu, setiap hasil optimasi harus selalu disertai informasi metode dan basis set. Struktur teroptimasi adalah struktur yang dianggap optimum dalam kerangka model tertentu, bukan kebenaran absolut yang bebas dari asumsi.

Dalam praktikum ini, optimasi geometri diterapkan pada molekul sederhana: H₂, H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂. Tujuannya bukan untuk mengejar akurasi riset tingkat tinggi, tetapi melatih mahasiswa memahami konsep dasar optimasi: struktur awal, energi, perubahan geometri, panjang ikatan, sudut ikatan, dan konvergensi.

2. Permukaan Energi Potensial

Permukaan energi potensial atau **potential energy surface** adalah representasi hubungan antara energi molekul dan koordinat inti atom. Secara matematis, energi molekul dapat dipandang sebagai fungsi dari posisi inti atom:

$$E = E(R_1, R_2, R_3, \dots, R_N)$$

dengan $R_1, R_2, R_3, \dots, R_N$ menyatakan posisi inti atom dalam molekul. Untuk molekul yang memiliki N atom, koordinat Cartesian totalnya adalah $3N$ karena setiap atom memiliki koordinat x, y , dan z . Energi molekul berubah ketika koordinat atom berubah. Maka, permukaan energi potensial adalah lanskap multidimensi yang menggambarkan energi untuk berbagai kemungkinan susunan atom.

Untuk molekul H_2 , konsep ini dapat dibayangkan secara sederhana. Hanya ada satu parameter utama, yaitu jarak $H-H$. Jika jarak $H-H$ terlalu besar, dua atom hampir tidak berikatan kuat. Jika jarak $H-H$ terlalu kecil, tolakan inti dan tolakan elektron meningkat. Di antara dua ekstrem tersebut terdapat jarak tertentu tempat energi minimum. Kurva energi terhadap jarak $H-H$ adalah contoh sederhana permukaan energi potensial satu dimensi.

Untuk molekul H_2O , situasinya lebih kompleks. Energi tidak hanya bergantung pada dua panjang ikatan $O-H$, tetapi juga sudut $H-O-H$. Untuk NH_3 dan CH_4 , jumlah koordinat internal bertambah. Untuk molekul besar, permukaan energi potensial menjadi sangat kompleks, memiliki banyak lembah, puncak, jalur, dan titik pelana. Karena itu, optimasi geometri pada molekul besar dapat menjadi sulit.

Permukaan energi potensial menjelaskan mengapa suatu molekul dapat memiliki banyak konformasi. Setiap konformasi dapat berada pada minimum lokal yang berbeda. Misalnya, pada molekul fleksibel seperti butana, rotasi di sekitar ikatan $C-C$ menghasilkan konformer anti dan gauche. Keduanya dapat menjadi minimum lokal, tetapi energinya berbeda. Oleh karena itu, satu kali optimasi dari satu struktur awal tidak selalu menjamin ditemukannya minimum global. Permukaan energi potensial memberikan kerangka untuk memahami optimasi, konformasi, vibrasi, dan reaksi kimia.

Secara konseptual, mahasiswa dapat membayangkan permukaan energi potensial seperti peta pegunungan dan lembah. Struktur awal adalah titik awal di permukaan tersebut. Optimasi adalah perjalanan menuruni lereng menuju lembah terdekat. Jika struktur awal berada di dekat lembah A, optimasi mungkin berakhir di lembah A. Jika struktur awal berada di dekat lembah B, optimasi mungkin berakhir di lembah B. Inilah sebabnya struktur awal penting.

3. Aproksimasi Born–Oppenheimer dan Geometri Molekul

Konsep geometri molekul dalam kimia kuantum sangat bergantung pada aproksimasi Born–Oppenheimer. Persamaan Schrödinger penuh untuk molekul mencakup gerak semua elektron dan semua inti sekaligus. Jika semua gerak tersebut diperlakukan secara bersamaan, persoalannya menjadi sangat kompleks. Aproksimasi Born–Oppenheimer menyederhanakan persoalan dengan memisahkan gerak elektron dan inti: elektron dianggap menyesuaikan diri secara cepat terhadap posisi inti yang relatif lebih lambat. Dengan demikian, energi elektronik dapat dihitung untuk posisi inti tertentu, lalu inti diperlakukan bergerak pada permukaan energi potensial.

Dalam optimasi geometri, aproksimasi ini tampak dalam alur kerja berikut:

posisi inti awal
 → hitung energi elektronik
 → hitung gradien energi terhadap posisi inti
 → geser inti
 → hitung energi elektronik baru
 → ulangi sampai konvergen

Pada setiap langkah, software menghitung energi elektronik untuk susunan inti tertentu. Kemudian posisi inti diubah sedikit demi sedikit. Elektron dianggap selalu menyesuaikan diri terhadap susunan inti baru. Dengan cara ini, struktur molekul dapat dicari sebagai susunan inti yang meminimalkan energi elektronik total menurut metode yang dipakai.

Aproksimasi Born–Oppenheimer memungkinkan kita berbicara tentang “geometri molekul”. Tanpa pemisahan elektron dan inti, konsep inti-inti berada pada susunan tetap akan lebih sulit digunakan. Dalam banyak keadaan dasar molekul, aproksimasi ini sangat berguna dan cukup baik. Namun, mahasiswa perlu mengetahui bahwa aproksimasi ini memiliki batas, terutama pada kasus keadaan tereksitasi, kopling nonadiabatik, atau situasi ketika gerak elektron dan inti tidak mudah dipisahkan.

Dalam Praktikum 2, batas tersebut belum menjadi fokus utama. Namun, mahasiswa harus memahami bahwa optimasi geometri bukan sekadar manipulasi gambar. Ia berakar pada perhitungan energi elektronik untuk posisi inti tertentu.

4. Gradien Energi dan Gaya pada Atom

Gradien energi adalah turunan energi terhadap koordinat atom. Secara matematis, gradien dapat ditulis sebagai:

$$\nabla E = (\partial E / \partial x_1, \partial E / \partial y_1, \partial E / \partial z_1, \dots, \partial E / \partial x_N, \partial E / \partial y_N, \partial E / \partial z_N)$$

Gradien menunjukkan bagaimana energi berubah jika atom digeser sedikit. Jika gradien besar, berarti energi berubah tajam terhadap perubahan koordinat. Jika gradien mendekati nol, berarti struktur berada di sekitar titik stasioner.

Dalam mekanika, gaya berhubungan dengan gradien energi melalui persamaan:

$$\mathbf{F} = -\nabla E$$

Artinya, gaya mengarah ke arah penurunan energi. Jika gradien energi besar, gaya pada atom juga besar. Jika gradien mendekati nol, gaya mendekati nol. Dalam optimasi geometri, software menggunakan gradien untuk menentukan arah perpindahan atom.

Secara intuitif, jika suatu ikatan terlalu pendek, atom-atom mengalami gaya yang mendorongnya menjauh. Jika ikatan terlalu panjang, gaya tarik dapat menarik atom mendekat. Jika sudut ikatan

tidak stabil, atom dapat bergerak untuk memperbaiki orientasi. Optimasi geometri mencoba mengurangi gaya-gaya tersebut sampai struktur cukup seimbang.

Dalam panduan optimasi Gaussian, titik minimum dan titik pelana dijelaskan sebagai titik dengan turunan pertama energi atau gradien sama dengan nol. Karena gradien adalah negatif dari gaya, gaya juga bernilai nol pada titik stasioner. Optimasi geometri dimulai dari struktur input, menghitung energi dan gradien, lalu menentukan arah serta besar langkah berikutnya pada permukaan energi potensial.

Bagi mahasiswa, konsep gradien penting karena menjelaskan mengapa struktur awal berubah selama optimasi. Software tidak “menebak” bentuk molekul akhir secara acak. Software menggunakan informasi matematis tentang arah penurunan energi.

5. Titik Stasioner, Minimum, dan Titik Pelana

Titik stasioner adalah titik pada permukaan energi potensial tempat gradien energi sama dengan nol:

$$\nabla E = 0$$

Namun, tidak semua titik stasioner adalah minimum. Titik stasioner dapat berupa:

1. **Minimum lokal.**
2. **Minimum global.**
3. **Titik pelana.**
4. **Maksimum lokal atau maksimum global.**

Dalam optimasi geometri biasa, tujuan utama adalah menemukan **minimum lokal**, yaitu struktur yang energinya lebih rendah daripada struktur di sekitarnya. Jika atom digeser sedikit ke berbagai arah, energi cenderung meningkat. Struktur semacam ini dianggap stabil secara lokal menurut metode yang digunakan.

Minimum global adalah struktur dengan energi paling rendah dari semua kemungkinan struktur. Pada molekul sederhana seperti H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 , perbedaan minimum lokal dan global tidak terlalu rumit. Namun, pada molekul fleksibel, perbedaan ini sangat penting. Molekul dapat memiliki banyak konformer yang masing-masing merupakan minimum lokal. Optimasi dari struktur awal tertentu biasanya menuju minimum terdekat, bukan selalu minimum global.

Titik pelana adalah titik yang minimum dalam beberapa arah tetapi maksimum dalam arah lain. Dalam kimia reaksi, titik pelana orde pertama sering berkaitan dengan keadaan transisi. Pada keadaan transisi orde pertama, terdapat satu arah yang menurun energi menuju reaktan dan produk. Inilah sebabnya frekuensi imajiner digunakan untuk mengidentifikasi keadaan transisi.

Dalam praktikum ini, mahasiswa fokus pada optimasi menuju minimum, bukan pencarian keadaan transisi. Namun, konsep titik pelana perlu diperkenalkan agar mahasiswa tidak menganggap semua titik stasioner adalah struktur stabil. Panduan optimasi menjelaskan bahwa suatu titik yang maksimum dalam satu arah dan minimum dalam arah lain disebut titik pelana, dan optimasi yang berhasil menemukan titik stasioner belum tentu selalu menemukan struktur yang diharapkan.

6. Geometri Kesetimbangan

Geometri kesetimbangan adalah susunan atom yang berada pada minimum energi lokal pada permukaan energi potensial. Pada geometri kesetimbangan, gaya pada atom mendekati nol dan struktur tidak lagi berubah secara signifikan jika optimasi dilanjutkan. Geometri kesetimbangan ditandai oleh panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut dihedral yang sesuai dengan energi minimum menurut metode tertentu.

Untuk molekul H_2 , geometri kesetimbangan ditentukan oleh jarak H–H. Untuk H_2O , geometri kesetimbangan ditentukan oleh dua panjang ikatan O–H dan sudut H–O–H. Untuk NH_3 , geometri kesetimbangan mencakup panjang N–H dan sudut H–N–H. Untuk CH_4 , geometri kesetimbangan mencakup panjang C–H dan sudut H–C–H. Untuk CO_2 , geometri kesetimbangan mencakup panjang C=O dan sudut O–C–O yang linear.

Secara praktis, geometri kesetimbangan tidak boleh hanya dinilai dari gambar. Molekul yang tampak rapi dalam visualisasi belum tentu sudah berada pada minimum. Mahasiswa harus memeriksa:

1. Status konvergensi.
2. Energi total akhir.
3. Panjang ikatan.
4. Sudut ikatan.
5. Kewajaran struktur berdasarkan teori VSEPR.
6. Jika tersedia, hasil frekuensi vibrasi.

Rujukan kimia kuantum menyatakan bahwa permukaan energi potensial molekul menyatakan energi sebagai fungsi koordinat inti, dan geometri kesetimbangan terletak pada minimum lokal permukaan energi potensial. Optimasi geometri mencari koordinat inti yang membuat gradien energi nol dan matriks gaya menunjukkan minimum.

Dengan demikian, geometri kesetimbangan adalah hasil matematika dan fisika, bukan sekadar bentuk visual yang indah.

7. Hessian, Kelengkungan Permukaan, dan Frekuensi Vibrasi

Selain gradien, konsep penting dalam optimasi adalah **Hessian**. Hessian adalah matriks turunan kedua energi terhadap koordinat atom:

$$H_{ij} = \partial^2 E / \partial q_i \partial q_j$$

Jika gradien menunjukkan kemiringan permukaan energi, Hessian menunjukkan kelengkungan permukaan. Kelengkungan ini penting untuk menentukan apakah suatu titik stasioner adalah minimum atau titik pelana.

Pada minimum lokal, permukaan energi melengkung ke atas dalam semua arah. Secara matematis, Hessian memiliki karakter positif untuk semua mode vibrasi yang relevan. Dalam perhitungan frekuensi, hal ini muncul sebagai semua frekuensi nyata atau positif. Pada titik pelana orde pertama, terdapat satu arah dengan kelengkungan negatif, sehingga muncul satu frekuensi imajiner. Pada titik pelana orde lebih tinggi, frekuensi imajiner lebih dari satu dapat muncul.

Optimasi geometri hanya mencari titik stasioner berdasarkan kriteria tertentu. Untuk memastikan bahwa struktur tersebut benar-benar minimum, perhitungan frekuensi diperlukan. Dalam rujukan kimia kuantum yang digunakan, optimasi geometri disebut hanya memberi energi pada titik stasioner, sedangkan frekuensi vibrasi diperoleh dari turunan kedua energi terhadap koordinat inti; pada minimum lokal semua frekuensi nyata, sedangkan pada titik sadel orde n terdapat n frekuensi imajiner.

Dalam praktikum dasar ini, mahasiswa mungkin belum selalu menjalankan perhitungan frekuensi untuk setiap molekul. Namun, konsepnya harus dikenalkan sejak awal. Struktur yang “optimization completed” lebih kuat lagi validasinya jika perhitungan frekuensi menunjukkan tidak ada frekuensi imajiner. Pada bab spektroskopi IR nanti, konsep Hessian dan frekuensi vibrasi akan dibahas lebih operasional.

8. Kriteria Konvergensi

Konvergensi adalah keadaan ketika proses optimasi telah memenuhi syarat numerik yang ditetapkan software. Optimasi tidak berhenti hanya karena energi sudah turun. Software memeriksa beberapa indikator, biasanya mencakup:

1. **Perubahan energi** antarlangkah.
2. **Gaya maksimum** pada koordinat atom.
3. **Gaya RMS** atau rata-rata akar kuadrat gaya.
4. **Perpindahan maksimum** atom.
5. **Perpindahan RMS** atom.

Jika semua kriteria tersebut berada di bawah ambang batas, optimasi dianggap konvergen. Jika belum, optimasi dilanjutkan. Jika jumlah langkah maksimum tercapai tetapi kriteria belum terpenuhi, optimasi dianggap belum konvergen.

Konvergensi penting karena struktur yang belum konvergen belum boleh langsung disebut struktur optimum. Struktur tersebut hanya struktur terakhir dari proses iterasi. Dalam panduan Gaussian, optimasi dianggap berhasil jika gaya maksimum, gaya RMS, perpindahan maksimum, dan perpindahan RMS sudah terpenuhi; jika optimasi belum konvergen, struktur akhir tidak boleh langsung disebut struktur optimum.

Mahasiswa harus membiasakan diri membaca status konvergensi dalam output. Tidak cukup hanya melihat adanya koordinat akhir. Banyak file output tetap menampilkan koordinat terakhir meskipun perhitungan gagal. Oleh karena itu, analisis geometri harus selalu dimulai dari pertanyaan:

Apakah optimasi konvergen?

Jika jawabannya tidak, maka panjang ikatan dan sudut ikatan hasil akhir harus ditafsirkan sebagai data sementara, bukan geometri kesetimbangan.

9. Energi Total dan Energi Relatif dalam Optimasi

Energi total adalah energi molekul pada geometri tertentu menurut metode yang digunakan. Dalam perhitungan kimia kuantum, energi total sering dilaporkan dalam satuan Hartree. Selama optimasi, energi total biasanya berubah dari langkah ke langkah. Secara umum, optimasi bertujuan menuju struktur dengan energi lebih rendah.

Namun, mahasiswa harus berhati-hati dalam menafsirkan energi total. Energi total absolut suatu molekul tidak selalu bermakna jika dibandingkan sembarangan dengan molekul lain yang berbeda jumlah atom dan komposisinya. Misalnya, energi total H₂O tidak dapat dibandingkan langsung dengan energi total NH₃ untuk menyimpulkan mana yang “lebih stabil” secara umum, karena jumlah elektron, inti, dan komposisinya berbeda. Yang lebih bermakna dalam optimasi adalah:

1. Apakah energi turun dari struktur awal ke struktur akhir?
2. Apakah energi sudah stabil pada akhir optimasi?
3. Apakah struktur akhir konvergen?
4. Apakah energi relatif antar konformer dibandingkan pada metode yang sama?

Energi total juga bergantung pada metode. Energi total dari Hartree–Fock tidak sama dengan DFT. Energi dari basis set kecil berbeda dari basis set besar. Karena itu, energi total harus selalu dilaporkan dengan metode dan basis set.

Dalam praktikum ini, energi total digunakan terutama untuk memahami arah optimasi. Jika struktur awal memiliki energi tinggi dan struktur akhir memiliki energi lebih rendah serta konvergen, maka optimasi berhasil memperbaiki geometri. Namun, kesimpulan stabilitas harus tetap proporsional.

10. Koordinat Molekul: Cartesian dan Internal

Optimasi geometri bekerja dengan koordinat molekul. Dua bentuk koordinat penting adalah **koordinat Cartesian** dan **koordinat internal**.

Koordinat Cartesian menuliskan posisi setiap atom dalam tiga angka:

Atom x y z

Contoh format XYZ untuk H₂O:

```
3
H2O
O   0.000000   0.000000   0.000000
H   0.758602   0.000000   0.504284
H  -0.758602   0.000000   0.504284
```

Koordinat internal menuliskan struktur melalui panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut dihedral. Contohnya, struktur H₂O dapat dijelaskan dengan dua panjang O–H dan satu sudut H–O–H. Koordinat internal sering lebih dekat dengan bahasa kimia karena kimiawan biasa berpikir dalam ikatan dan sudut, bukan hanya koordinat x, y, z.

Dalam software kimia kuantum, optimasi dapat dilakukan menggunakan koordinat Cartesian, koordinat internal, atau koordinat campuran. Pilihan koordinat dapat memengaruhi efisiensi optimasi. Untuk molekul kecil, perbedaan ini mungkin tidak terlalu terasa bagi mahasiswa. Namun, untuk molekul besar, pilihan koordinat dan kualitas struktur awal dapat memengaruhi konvergensi.

Bagi Praktikum 2, mahasiswa cukup memahami bahwa koordinat XYZ dapat dianalisis dengan Python untuk menghitung panjang ikatan dan sudut ikatan. Dengan demikian, koordinat Cartesian dapat diterjemahkan menjadi parameter kimia yang lebih mudah dipahami.

11. Contoh Teori pada Molekul H₂

Molekul H₂ adalah contoh paling sederhana untuk menjelaskan optimasi geometri. Parameter geometri utamanya hanya satu, yaitu jarak H–H. Jika jarak H–H dibuat sangat jauh, atom H hampir tidak berinteraksi kuat. Jika jarak H–H dibuat terlalu pendek, tolakan antarinti dan tolakan elektron meningkat. Di antara dua keadaan tersebut terdapat jarak optimum tempat energi minimum.

Secara konseptual, kurva energi H₂ terhadap jarak H–H dapat digambarkan sebagai lembah. Titik minimum lembah adalah jarak ikatan kesetimbangan. Optimasi geometri H₂ berarti mencari jarak H–H yang memberikan energi minimum menurut metode tertentu.

Contoh analisis:

Struktur awal H_2 dibuat dengan jarak H-H 1,20 Å. Setelah optimasi, jarak H-H berkurang menuju nilai yang lebih wajar. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal berada pada energi lebih tinggi dan optimasi menggeser atom menuju jarak ikatan yang lebih stabil.

Contoh ini membantu mahasiswa memahami bahwa optimasi bukan konsep abstrak. Ia dapat dilihat langsung sebagai perubahan jarak ikatan.

12. Contoh Teori pada H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2

Pada H_2O , optimasi geometri mencari panjang O-H dan sudut H-O-H yang stabil. Teori VSEPR memprediksi bentuk bengkok karena atom O memiliki dua pasangan ikatan dan dua pasangan elektron bebas. Optimasi geometri memberi nilai numerik yang dapat dibandingkan dengan prediksi tersebut.

Pada NH_3 , optimasi mencari panjang N-H dan sudut H-N-H. VSEPR memprediksi bentuk trigonal piramida karena terdapat tiga pasangan ikatan dan satu pasangan bebas pada atom N. Bentuk ini berbeda dari trigonal planar karena pasangan bebas menempati ruang dan memengaruhi sudut.

Pada CH_4 , optimasi mencari panjang C-H dan sudut H-C-H. VSEPR memprediksi bentuk tetrahedral dengan sudut ideal sekitar $109,5^\circ$. Struktur yang teroptimasi seharusnya mendekati bentuk tetrahedral jika metode dan input benar.

Pada CO_2 , optimasi mencari panjang C=O dan sudut O-C-O. VSEPR memprediksi bentuk linear karena terdapat dua daerah kerapatan elektron di sekitar atom C. Sudut O-C-O seharusnya mendekati 180° .

Dengan molekul-molekul sederhana ini, mahasiswa belajar menghubungkan optimasi geometri dengan teori bentuk molekul. Hasil optimasi tidak hanya dilihat sebagai angka, tetapi sebagai bukti struktur.

13. Hubungan Geometri dengan Sifat Molekul

Geometri molekul memengaruhi banyak sifat kimia. Panjang ikatan memengaruhi kekuatan ikatan dan frekuensi vibrasi. Sudut ikatan memengaruhi bentuk molekul dan momen dipol. Sudut dihedral memengaruhi konformasi dan energi relatif. Oleh karena itu, optimasi geometri menjadi prasyarat untuk banyak analisis lanjutan. Rujukan kimia komputasi yang digunakan menegaskan bahwa struktur molekul menentukan banyak sifat: panjang ikatan memengaruhi frekuensi vibrasi, sudut ikatan memengaruhi bentuk molekul dan momen dipol, serta sudut dihedral memengaruhi konformasi dan energi relatif.

Contoh:

- H_2O memiliki bentuk bengkok sehingga memiliki momen dipol.
- CO_2 linear dan simetris sehingga momen dipol totalnya nol.
- CH_4 tetrahedral dan simetris sehingga momen dipol totalnya nol.
- NH_3 trigonal piramida sehingga memiliki momen dipol.

Dengan demikian, geometri bukan hanya bentuk. Geometri adalah dasar untuk memahami sifat elektronik, spektroskopi, dan reaktivitas molekul.

14. Analisis Kritis terhadap Dasar Teori Optimasi

Optimasi geometri sering disalahpahami sebagai prosedur otomatis yang selalu menghasilkan struktur benar. Pemahaman ini harus dikritisi. Ada beberapa batas penting.

Pertama, optimasi bergantung pada struktur awal. Jika struktur awal buruk, optimasi dapat gagal atau menuju minimum lokal yang tidak diharapkan. Kedua, hasil bergantung pada metode dan basis set. Metode sederhana dapat memberi geometri kurang akurat, sedangkan metode lebih tinggi memerlukan biaya komputasi lebih besar. Ketiga, konvergensi tidak selalu berarti minimum global. Konvergensi hanya berarti kriteria numerik terpenuhi. Keempat, tanpa perhitungan frekuensi, status minimum sejati belum sepenuhnya dipastikan. Kelima, output software harus dibaca secara kritis.

Mahasiswa juga harus memahami bahwa optimasi geometri tidak boleh dipisahkan dari kimia. Jika hasil optimasi H_2O menjadi linear, mahasiswa harus curiga. Jika CH_4 tidak mendekati tetrahedral, perlu diperiksa. Jika CO_2 tidak linear tanpa alasan tertentu, input atau optimasi mungkin bermasalah. Teori VSEPR dan literatur tetap diperlukan sebagai pembanding.

Dengan demikian, dasar teori optimasi mengajarkan keseimbangan antara kepercayaan pada perhitungan dan sikap kritis terhadap output.

15. Implikasi Pedagogis

Dasar teori optimasi geometri memiliki implikasi penting dalam pembelajaran kimia kuantum. Pertama, mahasiswa belajar bahwa struktur molekul adalah hasil energi minimum, bukan sekadar gambar. Kedua, mahasiswa belajar membaca molekul sebagai objek tiga dimensi yang memiliki koordinat. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa energi, gaya, dan geometri saling terkait. Keempat, mahasiswa belajar bahwa hasil software harus divalidasi. Kelima, mahasiswa mulai memahami hubungan antara teori kimia dasar seperti VSEPR dan metode komputasi modern.

Praktikum ini juga memperkuat keterampilan berpikir ilmiah. Mahasiswa tidak hanya bertanya “berapa panjang ikatannya?”, tetapi juga “apakah struktur sudah konvergen?”, “apakah panjang ikatan masuk akal?”, “apakah sudut sesuai teori?”, “apakah hasil bergantung metode?”, dan

“apakah struktur benar-benar minimum?”. Pertanyaan semacam ini penting untuk membentuk pengguna kimia komputasi yang kritis.

16. Transisi ke Software yang Digunakan

Setelah dasar teori optimasi geometri dipahami, langkah berikutnya adalah mengenal software yang digunakan. Subbab 5.3 akan membahas ChemCompute, Avogadro, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan Python. Setiap software memiliki peran berbeda. Avogadro digunakan untuk membangun struktur awal. ChemCompute dapat menjadi platform web untuk menjalankan perhitungan. GAMESS, ORCA, Gaussian, dan Psi4 digunakan untuk optimasi geometri pada tingkat teori tertentu. Python digunakan untuk membaca koordinat, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membuat tabel, dan memvisualisasikan struktur.

Dengan pemahaman teori pada subbab ini, mahasiswa akan lebih siap menggunakan software secara bermakna. Mereka tidak hanya menjalankan perintah optimasi, tetapi memahami bahwa software sedang menelusuri permukaan energi potensial, menghitung gradien, mencari titik minimum, dan memeriksa konvergensi.

5.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 2 dipilih untuk mendukung seluruh alur optimasi geometri molekul sederhana, mulai dari membangun struktur awal, menjalankan optimasi, membaca output, mengambil koordinat akhir, menghitung panjang ikatan dan sudut ikatan, sampai menyusun tabel serta visualisasi hasil. Dalam praktikum ini, software tidak dipahami sebagai alat yang berdiri sendiri-sendiri, tetapi sebagai bagian dari **workflow komputasi kimia**. Setiap software memiliki peran tertentu: ada yang berfungsi sebagai editor struktur, ada yang menjalankan perhitungan struktur elektronik, ada yang menjadi platform web, dan ada yang dipakai untuk analisis pascaproses.

Software yang digunakan dalam Bab 5 adalah:

1. **ChemCompute.**
2. **Avogadro.**
3. **GAMESS.**
4. **ORCA.**
5. **Gaussian.**
6. **Psi4.**
7. **Python.**

Ketujuh perangkat tersebut tidak harus semuanya digunakan secara bersamaan oleh setiap mahasiswa. Dalam praktikum dasar, jalur utama yang paling mudah adalah **Avogadro** → **ChemCompute/GAMESS** → **unduh output** → **Python untuk analisis geometri**. Namun, dosen dapat memperluas praktikum dengan ORCA, Gaussian, atau Psi4 jika fasilitas tersedia. Dengan demikian, subbab ini bertujuan menjelaskan fungsi masing-masing software, kedudukannya dalam

alur kerja, kelebihan dan keterbatasannya, serta bagaimana software tersebut membantu mahasiswa memahami optimasi geometri secara ilmiah.

1. Prinsip Pemilihan Software dalam Optimasi Geometri

Pemilihan software dalam praktikum optimasi geometri harus mengikuti tujuan pembelajaran, bukan sekadar mengikuti popularitas program. Praktikum ini bertujuan agar mahasiswa mampu membangun struktur molekul, menjalankan optimasi, membaca energi total, memeriksa konvergensi, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, dan membandingkan geometri awal serta akhir. Oleh karena itu, software yang dipilih harus mendukung lima kebutuhan utama:

1. **Pembuatan struktur awal molekul.**
2. **Penulisan atau pembuatan input komputasi.**
3. **Eksekusi optimasi geometri.**
4. **Pembacaan output dan status konvergensi.**
5. **Analisis geometri secara numerik dan visual.**

Tidak semua software melakukan semua tugas dengan sama baik. Avogadro sangat baik untuk membangun dan melihat struktur molekul. ChemCompute memudahkan akses berbasis web ke paket komputasi, terutama untuk pembelajaran sarjana. GAMESS, ORCA, Gaussian, dan Psi4 berperan sebagai mesin perhitungan struktur elektronik. Python berperan sebagai alat analisis pascaproses yang membaca koordinat, menghitung jarak, menghitung sudut, membuat tabel, serta menyimpan output analisis.

Secara metodologis, mahasiswa harus memahami bahwa software kimia komputasi tidak boleh diperlakukan sebagai “kotak hitam”. Setiap software menerima input tertentu, menjalankan model matematika tertentu, lalu menghasilkan output yang harus dibaca secara kritis. Jika struktur awal buruk, metode tidak sesuai, basis set terlalu kecil, atau optimasi tidak konvergen, output yang tampak rapi tetap dapat menyesatkan. Karena itu, pemilihan dan penggunaan software harus selalu dikaitkan dengan teori optimasi geometri yang telah dibahas pada subbab 5.2.

2. ChemCompute sebagai Platform Web Praktikum

ChemCompute adalah platform berbasis web yang dirancang untuk membantu pengajaran dan penelitian kimia komputasi tingkat sarjana tanpa mahasiswa harus menangani instalasi dan pemeliharaan software komputasi secara lokal. ChemCompute menyediakan akses ke paket kimia komputasi dan halaman pakatnya menyebutkan bahwa GAMESS serta Jupyter Notebooks memiliki eksperimen siap pakai untuk kelas. (chemcompute.org)

Dalam Praktikum 2, ChemCompute berperan sebagai **platform eksekusi**. Mahasiswa dapat membangun atau mengunggah struktur, memilih jenis perhitungan, menjalankan optimasi geometri, lalu mengunduh file output. Peran ini sangat penting dalam kelas besar karena tidak

semua mahasiswa memiliki komputer yang siap menjalankan software kimia kuantum lokal. Dengan platform web, hambatan instalasi berkurang dan mahasiswa dapat fokus pada konsep optimasi geometri.

Alur umum penggunaan ChemCompute dalam Praktikum 2 adalah:

```
membangun struktur awal
→ memilih paket perhitungan
→ memilih jenis job optimasi geometri
→ memilih metode dan basis set
→ menjalankan perhitungan
→ memeriksa status job
→ mengunduh file output
→ menganalisis koordinat akhir dengan Python
```

Kelebihan ChemCompute adalah aksesibilitas. Mahasiswa cukup menggunakan browser dan akun yang sesuai. ChemCompute juga memberi pengalaman laboratorium komputasi modern, yaitu perhitungan tidak selalu dilakukan di komputer lokal, tetapi dapat dijalankan melalui server. Hal ini sejalan dengan perkembangan pendidikan kimia komputasi berbasis cloud.

Namun, ChemCompute juga memiliki keterbatasan. Pertama, akses bergantung pada internet dan ketersediaan layanan. Kedua, pilihan software, metode, basis set, dan eksperimen dapat berubah sesuai kebijakan platform. Ketiga, mahasiswa tetap harus mengunduh dan menyimpan output secara tertib. Keempat, kemudahan antarmuka dapat membuat mahasiswa terlalu pasif jika hanya memilih menu tanpa membaca input dan output.

Karena itu, dalam praktikum ini ChemCompute dipakai sebagai sarana, bukan sebagai pengganti pemahaman. Mahasiswa tetap wajib membaca output, mencatat metode, basis set, muatan, multiplicity, energi total akhir, koordinat akhir, dan status konvergensi.

3. Avogadro sebagai Editor dan Visualizer Molekul

Avogadro adalah editor dan visualizer molekul bebas dan sumber terbuka yang dirancang untuk mahasiswa dan peneliti, serta digunakan dalam kimia komputasi, pemodelan molekul, pendidikan kimia, bioinformatika, dan bidang terkait. Dokumentasi Avogadro menyebutnya sebagai molecular editor dan visualization tool yang fleksibel untuk berbagai jenis sistem kimia. ([Avogadro](#))

Dalam Praktikum 2, Avogadro berperan terutama sebagai **pembangun struktur awal**. Mahasiswa dapat menggambar H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , atau CO_2 , mengatur atom dan ikatan, melakukan perapian struktur awal secara sederhana, lalu menyimpan struktur dalam format yang dapat digunakan oleh software komputasi. Avogadro juga dapat membantu mahasiswa melihat struktur tiga dimensi, memutar molekul, mengukur panjang ikatan, dan mengukur sudut ikatan secara visual.

Peran Avogadro dalam praktikum ini meliputi:

1. Membuat struktur awal molekul.
2. Menampilkan struktur dalam ruang tiga dimensi.
3. Mengecek apakah atom dan ikatan sudah masuk akal.
4. Menyimpan koordinat dalam format XYZ.
5. Menyiapkan struktur untuk input GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software lain.
6. Membandingkan struktur awal dan akhir secara visual.

Avogadro penting karena mahasiswa pemula sering berpikir molekul dalam gambar dua dimensi. Dengan Avogadro, mahasiswa melihat bahwa molekul memiliki bentuk ruang. H₂O tidak hanya H–O–H di atas kertas, tetapi memiliki sudut tertentu. NH₃ bukan segitiga datar, melainkan trigonal piramida. CH₄ bukan bentuk silang dua dimensi, melainkan tetrahedral. CO₂ linear dan simetris. Dengan demikian, Avogadro membantu transisi dari rumus molekul ke geometri molekul.

Secara kritis, mahasiswa harus memahami bahwa struktur yang dibangun di Avogadro adalah **struktur awal**, bukan hasil akhir. Perapian struktur dengan force field sederhana di Avogadro dapat membantu memperbaiki tebakan awal, tetapi tidak sama dengan optimasi geometri kuantum pada tingkat teori tertentu. Struktur dari Avogadro tetap harus dioptimasi menggunakan paket komputasi seperti GAMESS, ORCA, Gaussian, atau Psi4 jika tujuan praktikum adalah optimasi geometri kimia kuantum.

4. GAMESS sebagai Mesin Perhitungan melalui ChemCompute

GAMESS, atau **General Atomic and Molecular Electronic Structure System**, adalah paket kimia kuantum ab initio umum yang dikelola oleh Gordon Research Group di Iowa State University. Situs resmi GAMESS menyebutnya sebagai general ab initio quantum chemistry package. ([Msg Chem Iowa State](http://www.msg.chem.iowa.edu))

Dalam Praktikum 2, GAMESS berperan sebagai salah satu mesin perhitungan utama, terutama jika dijalankan melalui ChemCompute. ChemCompute sendiri menyediakan akses ke GAMESS, dan halaman ChemCompute untuk GAMESS menjelaskan bahwa GAMESS adalah paket kimia kuantum yang dikelola oleh anggota Gordon Research Group. (chemcompute.org)

GAMESS dapat digunakan untuk optimasi geometri molekul sederhana seperti H₂, H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂. Dalam praktikum dasar, mahasiswa dapat memilih metode sederhana seperti Hartree–Fock dengan basis set kecil untuk memahami alur kerja optimasi. Jika kelas lebih lanjut, dosen dapat memperkenalkan DFT atau basis set yang lebih besar.

Peran GAMESS dalam praktikum:

1. Menghitung energi elektronik molekul.
2. Melakukan optimasi geometri.
3. Menghasilkan file output berisi energi, koordinat, iterasi, dan status perhitungan.
4. Menyediakan koordinat akhir untuk dianalisis dengan Python.
5. Memberi pengalaman membaca output kimia kuantum standar.

Kelebihan GAMESS dalam konteks pendidikan adalah integrasinya dengan ChemCompute. Mahasiswa tidak harus menginstalnya sendiri, tetapi tetap dapat mengalami proses job submission dan membaca output nyata. Ini membuat GAMESS sangat cocok sebagai mesin optimasi pada kelas sarjana.

Namun, mahasiswa perlu memahami bahwa output GAMESS cukup teknis. Output dapat memuat banyak bagian yang tidak semuanya dibutuhkan pada praktikum dasar. Mahasiswa harus diarahkan untuk mencari informasi utama: metode, basis set, energi total, koordinat akhir, dan status konvergensi. Jika mahasiswa tidak dibimbing, mereka dapat kebingungan membaca file output yang panjang.

5. ORCA sebagai Alternatif Perhitungan Lokal atau Institusional

ORCA adalah paket kimia kuantum yang luas penggunaannya untuk perhitungan ab initio, DFT, semiempiris, dan berbagai metode struktur elektronik lain. Manual ORCA versi 6.1 tersedia secara resmi dan mendokumentasikan fitur serta sintaks perhitungan program tersebut. ([FACCTs](#)) Publikasi program ORCA juga menunjukkan bahwa ORCA memiliki optimizer geometri yang bekerja dalam siklus perhitungan energi dan gradien, dengan kinerja yang kompetitif untuk optimasi geometri. ([AIP Publishing](#))

Dalam Praktikum 2, ORCA dapat digunakan sebagai jalur alternatif jika dosen atau laboratorium menyediakan instalasi lokal. ORCA sangat berguna untuk memperkenalkan input berbasis teks. Mahasiswa menulis file input, menjalankan perintah, lalu membaca output. Jalur ini lebih teknis dibanding ChemCompute, tetapi sangat baik untuk membangun kemandirian komputasi.

Contoh alur ORCA:

```
buat file XYZ
→ tulis file input ORCA
→ jalankan ORCA
→ baca output
→ ambil koordinat akhir
→ analisis dengan Python
```

Contoh input sederhana ORCA untuk optimasi geometri dapat berbentuk konseptual seperti:

```
! HF STO-3G Opt

* xyz 0 1
O  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.758602  0.000000  0.504284
H -0.758602  0.000000  0.504284
*
```

Input tersebut menunjukkan metode, basis set, jenis job, muatan, multiplicity, dan koordinat. Mahasiswa harus memahami setiap bagian. `Opt` menunjukkan optimasi geometri. `xyz 0 1`

menunjukkan format koordinat XYZ, muatan total 0, dan multiplicity 1. Koordinat atom ditulis dalam tiga dimensi.

Kelebihan ORCA adalah fleksibilitas metode, dokumentasi yang luas, dan kemampuan menjalankan perhitungan modern. Keterbatasannya untuk kelas pemula adalah kebutuhan instalasi, konfigurasi, dan pemahaman terminal. Oleh karena itu, ORCA lebih cocok untuk kelas yang sudah siap secara teknis atau sebagai jalur pengayaan.

6. Gaussian sebagai Software Komersial Struktur Elektronik

Gaussian adalah salah satu paket struktur elektronik komersial yang sangat dikenal dalam kimia komputasi. Gaussian 16 disebut oleh situs resminya sebagai bagian dari seri program struktur elektronik Gaussian yang digunakan oleh kimiawan, insinyur kimia, biokimiawan, fisikawan, dan ilmuwan lain. (gaussian.com) Dokumentasi Gaussian menjelaskan bahwa keyword `Opt` digunakan untuk menjalankan optimasi geometri, yaitu geometri akan disesuaikan sampai titik stasioner pada permukaan potensial ditemukan. (gaussian.com)

Dalam Praktikum 2, Gaussian dapat digunakan jika institusi memiliki lisensi resmi. Gaussian sering dipasangkan dengan GaussView untuk membangun struktur, menyiapkan input, menjalankan job, dan melihat hasil. Namun, karena Gaussian adalah software komersial, penggunaannya bergantung pada ketersediaan lisensi dan kebijakan institusi.

Peran Gaussian dalam praktikum:

1. Menjalankan optimasi geometri dengan berbagai metode.
2. Menampilkan output energi, geometri, dan status optimasi.
3. Menghasilkan struktur akhir untuk analisis.
4. Menjadi pembanding terhadap hasil GAMESS, ORCA, atau Psi4.
5. Memperkenalkan format input dan keyword seperti `Opt` dan `Freq`.

Dalam konteks pembelajaran, Gaussian sangat baik untuk menunjukkan standar kerja kimia komputasi profesional. Namun, mahasiswa harus memahami bahwa penggunaan Gaussian harus mengikuti lisensi. Tidak boleh menggunakan salinan ilegal. Dari sisi etika akademik, software berlisensi harus dipakai secara sah melalui institusi atau lisensi resmi.

Secara kritis, Gaussian tidak otomatis lebih “benar” daripada software lain hanya karena berbayar. Hasil tetap bergantung pada metode, basis set, input, dan konvergensi. Mahasiswa harus tetap membaca output secara kritis dan membandingkan geometri dengan teori VSEPR serta data literatur.

7. Psi4 sebagai Software Open-Source Berbasis Python

Psi4 adalah paket kimia kuantum sumber terbuka dengan inti C++/Python yang dapat diintegrasikan dan diperluas melalui ekosistem perangkat lunak komunitas. Situs resmi Psi4 menekankan sifatnya sebagai open-source quantum chemistry dan menyebut bahwa Psi4 memiliki inti C++/Python yang modular. (psicode.org) Repositori resminya juga menjelaskan bahwa Psi4 adalah suite program ab initio quantum chemistry untuk simulasi sifat molekul yang efisien dan akurat, dengan driver Python yang fleksibel. ([GitHub](https://github.com/psi4))

Dalam Praktikum 2, Psi4 dapat digunakan sebagai jalur yang sangat menarik karena dekat dengan Python. Mahasiswa dapat menjalankan optimasi geometri dan analisis dalam ekosistem Python yang sama. Ini memperkuat integrasi antara perhitungan struktur elektronik dan analisis pascaproses.

Contoh peran Psi4:

1. Menjalankan perhitungan energi dan optimasi geometri.
2. Menggunakan input molekul dalam script Python.
3. Menghasilkan energi total dan geometri akhir.
4. Menghubungkan langsung perhitungan kimia kuantum dengan analisis Python.
5. Menjadi alternatif open-source untuk kelas yang tidak memiliki lisensi Gaussian.

Kelebihan Psi4 adalah integrasinya dengan Python. Mahasiswa dapat melihat bahwa kimia kuantum tidak selalu terpisah dari scripting ilmiah. Namun, Psi4 memerlukan instalasi dan konfigurasi yang mungkin lebih teknis dibanding ChemCompute. Karena itu, Psi4 dapat dijadikan jalur mandiri atau pengayaan bagi mahasiswa yang sudah siap.

Secara pedagogis, Psi4 sangat berguna untuk menekankan reproduisibilitas. Seluruh perhitungan dapat ditulis sebagai script Python yang memuat molekul, metode, basis set, job optimasi, dan analisis. Ini sejalan dengan prinsip Bab 3 tentang kode yang dapat dijalankan ulang.

8. Python sebagai Alat Analisis Pascaproses

Python dalam Praktikum 2 berperan sebagai alat analisis pascaproses, bukan terutama sebagai mesin kimia kuantum. Python digunakan untuk membaca koordinat XYZ, menghitung jarak antaratom, menghitung sudut ikatan, membuat tabel panjang ikatan, membuat tabel sudut ikatan, membuat plot struktur sederhana 3D, dan membandingkan geometri awal dengan geometri akhir. Python sendiri adalah bahasa pemrograman yang dirancang agar pengguna dapat bekerja cepat dan mengintegrasikan sistem secara efektif. ([Python.org](https://python.org))

Peran Python sangat penting karena output dari software kimia kuantum sering perlu diolah lebih lanjut. File output GAMESS, ORCA, Gaussian, atau Psi4 dapat berisi koordinat akhir, tetapi panjang ikatan dan sudut ikatan perlu dihitung atau disusun dalam tabel. Dengan Python, mahasiswa dapat membuat analisis yang transparan dan reproduibel.

Fungsi Python dalam Praktikum 2:

1. Membaca file XYZ awal dan akhir.
2. Menghitung panjang ikatan menggunakan rumus jarak Euclidean.
3. Menghitung sudut ikatan menggunakan operasi vektor.
4. Membuat tabel CSV panjang ikatan.
5. Membuat tabel CSV sudut ikatan.
6. Membuat visualisasi struktur 3D sederhana.
7. Membandingkan geometri awal dan akhir.
8. Menyusun output yang siap dimasukkan ke laporan.

Contoh fungsi jarak:

```
def hitung_jarak(atom_A, atom_B):
    return np.linalg.norm(atom_B - atom_A)
```

Contoh fungsi sudut:

```
def hitung_sudut(atom_A, atom_B, atom_C):
    v1 = atom_A - atom_B
    v2 = atom_C - atom_B
    cos_theta = np.dot(v1, v2) / (np.linalg.norm(v1) * np.linalg.norm(v2))
    cos_theta = np.clip(cos_theta, -1.0, 1.0)
    return np.degrees(np.arccos(cos_theta))
```

Kode tersebut menunjukkan bahwa panjang ikatan dan sudut ikatan tidak harus dibaca secara manual dari visualizer. Mahasiswa dapat menghitungnya langsung dari koordinat. Ini memperkuat pemahaman bahwa geometri molekul adalah data numerik tiga dimensi.

9. Perbandingan Peran Software dalam Praktikum

Berikut ringkasan peran software dalam Praktikum 2.

Software	Peran Utama	Kelebihan	Keterbatasan
ChemCompute	Platform web untuk menjalankan perhitungan	Mudah diakses, cocok untuk kelas sarjana	Bergantung internet dan ketersediaan layanan
Avogadro	Membangun dan melihat struktur awal	Visual, intuitif, open-source	Bukan pengganti optimasi kuantum
GAMESS	Mesin perhitungan struktur elektronik	Terintegrasi baik dengan ChemCompute	Output teknis dan perlu dibaca hati-hati
ORCA	Mesin perhitungan lokal/institusional	Kuat, modern, fleksibel	Perlu instalasi dan terminal
Gaussian	Software struktur elektronik komersial	Sangat luas digunakan, dokumentasi keyword matang	Memerlukan lisensi resmi

Psi4	Software open-source berbasis Python	Reproduktibel, modular, dekat dengan scripting	Perlu instalasi dan kesiapan teknis
Python	Analisis geometri dan output	Transparan, fleksibel, reproduktibel	Memerlukan pemahaman kode

Tabel ini menunjukkan bahwa praktikum tidak harus memilih satu software tunggal. Justru alur kerja yang baik sering menggabungkan beberapa software. Avogadro membangun struktur. ChemCompute/GAMESS menjalankan optimasi. Python menganalisis hasil. ORCA, Gaussian, dan Psi4 dapat menjadi jalur alternatif atau pembandingan.

10. Alur Kerja Software yang Direkomendasikan

Untuk kelas dasar, alur kerja yang direkomendasikan adalah:

Avogadro

- membuat struktur awal
- menyimpan XYZ

ChemCompute/GAMESS

- menjalankan optimasi geometri
- mengunduh output

Python

- membaca koordinat awal dan akhir
- menghitung panjang ikatan dan sudut ikatan
- membuat tabel dan gambar
- menyimpan CSV dan grafik

Laporan

- membandingkan hasil dengan VSEPR dan literatur

Alur tersebut sederhana, tetapi lengkap. Mahasiswa mempelajari pembuatan struktur, optimasi, output, analisis, dan pelaporan.

Untuk kelas yang lebih maju, alur dapat diperluas:

Avogadro

- ORCA/Gaussian/Psi4
- Python
- perbandingan metode
- analisis literatur

Dalam jalur lanjutan, mahasiswa dapat membandingkan hasil HF/STO-3G, B3LYP/6-31G(d), atau metode lain. Namun, pada Praktikum 2 dasar, fokus utama tetap pada alur optimasi dan analisis geometri, bukan pada kompetisi metode.

11. Contoh Pembagian Tugas Software Berdasarkan Molekul

Untuk molekul model H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 , pembagian tugas software dapat dibuat sebagai berikut:

Tahap	H_2	H_2O	NH_3	CH_4	CO_2
Struktur awal	Avogadro	Avogadro	Avogadro	Avogadro	Avogadro
Optimasi	ChemCompute /GAMESS	ChemCompute /GAMESS	ChemCompute /GAMESS	ChemCompute /GAMESS	ChemCompute /GAMESS
Alternatif	ORCA/Psi4/Gaussian	ORCA/Psi4/Gaussian	ORCA/Psi4/Gaussian	ORCA/Psi4/Gaussian	ORCA/Psi4/Gaussian
Analisis	Python	Python	Python	Python	Python
Pembandingan teori	Ikatan H–H	VSEPR bengkok	VSEPR trigonal piramida	VSEPR tetrahedral	VSEPR linear

Pembagian ini membuat mahasiswa memahami bahwa semua molekul melewati alur yang sama, tetapi analisisnya berbeda. H_2 fokus pada jarak ikatan. H_2O dan NH_3 fokus pada sudut yang dipengaruhi pasangan bebas. CH_4 fokus pada simetri tetrahedral. CO_2 fokus pada linearitas.

12. Standar Informasi Software yang Harus Dicatat

Setiap praktikum harus mencatat informasi software secara eksplisit. Informasi minimal yang harus masuk laporan adalah:

1. Nama software yang digunakan.
2. Versi software jika diketahui.
3. Platform eksekusi, misalnya ChemCompute, komputer lokal, atau server kampus.
4. Metode komputasi.
5. Basis set.
6. Muatan molekul.
7. Multiplicity.
8. Jenis job, yaitu optimasi geometri.
9. Nama file input.
10. Nama file output.
11. Status konvergensi.

Contoh format metadata:

```
Software utama      : GAMESS melalui ChemCompute
Editor struktur    : Avogadro
Analisis           : Python
Jenis perhitungan  : Optimasi geometri
```



```

Metode           : HF
Basis set        : STO-3G
Muatan           : 0
Multiplicity     : 1
Molekul          : H2O
File input       : h2o_optimasi.inp
File output      : h2o_optimasi.out
Status           : Konvergen

```

Metadata semacam ini sangat penting untuk reproduibilitas. Tanpa metadata, hasil geometri tidak dapat dievaluasi dengan benar. Panjang ikatan dari satu metode tidak boleh dibandingkan dengan metode lain tanpa menyebut konteks perhitungannya.

13. Analisis Kritis terhadap Pemakaian Banyak Software

Penggunaan banyak software memiliki kelebihan dan risiko. Kelebihannya, mahasiswa mengenal ekosistem kimia komputasi yang nyata. Mereka memahami bahwa tidak ada satu software yang melakukan semuanya secara sempurna. Mereka belajar bahwa struktur dapat dibuat di satu software, dihitung di software lain, dan dianalisis dengan Python. Ini mencerminkan praktik kimia komputasi modern.

Namun, risikonya adalah mahasiswa dapat bingung jika peran software tidak dijelaskan dengan jelas. Mereka mungkin mengira Avogadro sudah melakukan optimasi kuantum padahal hanya merapikan struktur awal. Mereka mungkin mengira ChemCompute adalah metode kimia kuantum, padahal ChemCompute adalah platform. Mereka mungkin mengira GAMESS, ORCA, Gaussian, dan Psi4 selalu menghasilkan jawaban sama, padahal hasil bergantung pada metode, basis set, dan parameter. Mereka mungkin mengira Python menggantikan software kimia kuantum, padahal dalam praktikum ini Python terutama dipakai untuk analisis pascaproses.

Karena itu, dosen harus menekankan pembagian peran:

```

Avogadro = membangun dan melihat struktur
ChemCompute = platform menjalankan perhitungan
GAMESS/ORCA/Gaussian/Psi4 = mesin perhitungan kimia kuantum
Python = analisis geometri dan pelaporan data

```

Dengan pembagian ini, mahasiswa dapat menggunakan software secara sadar dan tidak terjebak pada kesalahpahaman.

14. Implikasi Etika dan Legalitas Software

Praktikum kimia komputasi juga memiliki dimensi etika. Software open-source seperti Avogadro dan Psi4 dapat digunakan secara bebas sesuai lisensinya. GAMESS memiliki ketentuan penggunaan tersendiri, dan akses melalui ChemCompute mengikuti aturan platform. Gaussian

adalah software komersial yang memerlukan lisensi resmi. Oleh karena itu, mahasiswa tidak boleh menggunakan software bajakan atau lisensi tidak sah.

Etika software berkaitan langsung dengan integritas akademik. Hasil praktikum yang diperoleh dari software ilegal bermasalah secara akademik. Selain itu, penggunaan software berlisensi harus menghormati kebijakan institusi. Jika institusi tidak memiliki Gaussian, maka praktikum dapat menggunakan ChemCompute/GAMESS, ORCA jika tersedia, Psi4, atau jalur lain yang sah.

Mahasiswa juga harus mencatat software yang digunakan secara jujur. Tidak boleh menulis menggunakan Gaussian jika sebenarnya menggunakan hasil dari software lain. Tidak boleh mengubah output agar tampak seperti berasal dari metode tertentu. Integritas komputasi mencakup kejujuran pada input, software, metode, dan output.

15. Implikasi Pedagogis

Pemilihan software dalam Praktikum 2 memiliki implikasi pedagogis besar. Avogadro membantu mahasiswa membangun intuisi spasial. ChemCompute membantu akses kelas besar. GAMESS memperkenalkan output struktur elektronik nyata. ORCA dan Gaussian memperkenalkan format input profesional. Psi4 memperkuat integrasi kimia kuantum dengan Python. Python melatih analisis numerik dan reproduisibilitas.

Dengan kombinasi ini, mahasiswa tidak hanya belajar “menggunakan program”, tetapi belajar **membangun workflow ilmiah**. Mereka mulai memahami bahwa kimia komputasi terdiri atas beberapa tahap: persiapan struktur, perhitungan, validasi, analisis, dan pelaporan. Setiap tahap memiliki software yang tepat dan standar yang harus dipenuhi.

Praktikum ini juga melatih mahasiswa menjadi pembaca output yang kritis. Mereka tidak hanya percaya pada tampilan molekul, tetapi memeriksa panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, dan konvergensi. Ini adalah keterampilan dasar yang akan terus dipakai pada Bab 6, Bab 7, Bab 8, Bab 9, dan Bab 10.

16. Transisi ke Molekul Model

Setelah software yang digunakan dipahami, langkah berikutnya adalah menetapkan molekul model. Subbab 5.4 akan membahas H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 sebagai sistem latihan optimasi geometri. Pemilihan molekul tersebut tidak bersifat acak, tetapi disusun secara pedagogis dari molekul paling sederhana menuju molekul dengan variasi bentuk geometri: diatomik, bengkok, trigonal piramida, tetrahedral, dan linear.

Dengan memahami peran software pada subbab ini, mahasiswa akan lebih siap mengerjakan molekul model secara tertib: membangun struktur awal di Avogadro, menjalankan optimasi

melalui ChemCompute/GAMESS atau software alternatif, kemudian menganalisis geometri dengan Python.

5.4 Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 2 adalah molekul-molekul sederhana yang dipilih sebagai sarana bertahap untuk memahami optimasi geometri, panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, dan status konvergensi. Pada praktikum ini, molekul yang digunakan adalah:

1. H_2
2. H_2O
3. NH_3
4. CH_4
5. CO_2

Pemilihan kelima molekul tersebut bukan pilihan acak. Molekul-molekul ini mewakili tingkat kerumitan geometri yang bertahap: H_2 sebagai molekul diatomik, H_2O sebagai molekul bengkok, NH_3 sebagai molekul trigonal piramida, CH_4 sebagai molekul tetrahedral, dan CO_2 sebagai molekul linear. Dengan urutan tersebut, mahasiswa dapat belajar dari sistem paling sederhana menuju sistem yang memiliki sudut ikatan dan simetri lebih kompleks.

Dalam kimia komputasi, molekul model berfungsi sebagai **sistem latihan terkontrol**. Sistem latihan harus cukup sederhana agar perhitungan cepat, tetapi cukup bermakna agar konsep kimia dapat dianalisis. Molekul yang terlalu besar akan menyulitkan mahasiswa pemula karena output menjadi panjang, jumlah koordinat banyak, dan risiko kesalahan input meningkat. Sebaliknya, molekul yang terlalu sederhana tidak cukup memperlihatkan variasi geometri. Lima molekul pada subbab ini dipilih untuk menyeimbangkan kesederhanaan komputasi dan kekayaan konsep kimia.

Pemilihan molekul kecil juga sesuai dengan prinsip praktikum komputasi kimia kuantum modern: praktikum dasar sebaiknya dimulai dari molekul kecil seperti H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 sebelum mahasiswa melanjutkan ke analisis sifat yang lebih kompleks seperti frekuensi vibrasi, momen dipol, muatan atom, energi HOMO-LUMO, dan orbital molekul.

1. Fungsi Molekul Model dalam Praktikum Optimasi Geometri

Molekul model berfungsi sebagai objek praktikum yang memungkinkan mahasiswa memahami hubungan antara teori dan hasil komputasi. Dalam Praktikum 2, setiap molekul model memiliki peran pedagogis tertentu.

Molekul	Fokus Utama	Konsep yang Ditekankan
H_2	Panjang ikatan diatomik	Energi minimum sebagai fungsi jarak antarinti
H_2O	Sudut bengkok	Pasangan elektron bebas dan geometri tidak linear
NH_3	Trigonal piramida	Pengaruh pasangan bebas pada sudut ikatan

CH ₄	Tetrahedral	Simetri tinggi dan sudut tetrahedral
CO ₂	Linear	Geometri linear dan simetri molekul

Melalui H₂, mahasiswa belajar bahwa optimasi geometri dapat dipahami sebagai pencarian jarak ikatan yang paling stabil. Melalui H₂O, mahasiswa memahami bahwa molekul dengan tiga atom tidak selalu linear. Melalui NH₃, mahasiswa melihat bahwa pasangan elektron bebas dapat mengubah bentuk molekul dari trigonal planar menjadi trigonal piramida. Melalui CH₄, mahasiswa memahami simetri tetrahedral. Melalui CO₂, mahasiswa mempelajari linearitas dan hubungan antara bentuk molekul dengan simetri.

Molekul model juga membantu mahasiswa memahami bahwa optimasi geometri bukan hanya menghasilkan gambar molekul akhir, tetapi menghasilkan data geometri yang dapat dihitung dan dibandingkan. Setiap molekul memberikan parameter yang harus dianalisis: panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, dan status konvergensi.

2. Prinsip Umum Pemilihan Molekul Model

Ada beberapa prinsip akademik dalam memilih molekul model untuk praktikum optimasi geometri.

Pertama, molekul harus **kecil**. Molekul kecil menghasilkan perhitungan yang cepat dan output yang tidak terlalu panjang. Hal ini penting karena tujuan praktikum adalah memahami konsep, bukan menghabiskan waktu pada biaya komputasi.

Kedua, molekul harus **representatif secara geometri**. H₂ mewakili molekul diatomik, H₂O mewakili molekul bengkok, NH₃ mewakili trigonal piramida, CH₄ mewakili tetrahedral, dan CO₂ mewakili linear. Dengan demikian, satu praktikum dapat memperlihatkan variasi bentuk molekul.

Ketiga, molekul harus **mudah dibandingkan dengan teori VSEPR**. Teori VSEPR memberi prediksi bentuk molekul berdasarkan jumlah daerah elektron di sekitar atom pusat. H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂ sangat cocok untuk tujuan ini karena bentuknya sering dibahas dalam kimia dasar.

Keempat, molekul harus **memiliki data literatur yang mudah ditemukan**. Panjang ikatan dan sudut ikatan molekul sederhana telah banyak dilaporkan dalam literatur eksperimen maupun teori. Ini memungkinkan mahasiswa membandingkan hasil optimasi dengan nilai rujukan.

Kelima, molekul harus **aman secara konseptual untuk pemula**. Molekul yang memiliki banyak konformer, spin kompleks, muatan tinggi, atau ikatan logam sebaiknya tidak digunakan pada praktikum awal karena dapat menimbulkan masalah interpretasi. Molekul H₂, H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂ relatif aman untuk tahap dasar.

Prinsip-prinsip tersebut menunjukkan bahwa pemilihan molekul model adalah keputusan pedagogis dan ilmiah sekaligus. Molekul model harus cukup sederhana untuk dihitung, tetapi cukup kaya untuk dianalisis.

3. H₂ sebagai Model Molekul Diatomik

H₂ adalah molekul paling sederhana dalam Praktikum 2. Molekul ini hanya memiliki dua atom dan satu parameter geometri utama, yaitu panjang ikatan H–H. Karena hanya ada satu jarak antarinti yang perlu dianalisis, H₂ menjadi contoh ideal untuk memahami hubungan antara jarak ikatan dan energi.

Dalam optimasi geometri H₂, mahasiswa membuat struktur awal dengan dua atom H pada jarak tertentu. Struktur awal tersebut dapat terlalu pendek, terlalu panjang, atau mendekati jarak kesetimbangan. Software kemudian menghitung energi dan menggeser posisi atom sampai jarak H–H mencapai nilai yang lebih stabil menurut metode yang digunakan.

Secara konseptual, H₂ memperlihatkan bentuk paling sederhana dari permukaan energi potensial. Energi molekul dapat dibayangkan sebagai fungsi jarak antarinti:

$$E = E(R_{HH})$$

Jika R_{HH} terlalu kecil, energi tinggi karena tolakan antarinti sangat kuat. Jika R_{HH} terlalu besar, ikatan melemah dan molekul mendekati dua atom H terpisah. Pada jarak tertentu, terdapat minimum energi yang menunjukkan panjang ikatan kesetimbangan.

H₂ juga penting untuk memperkenalkan gagasan orbital molekul. Dua orbital 1s dari atom H dapat berkombinasi membentuk orbital ikatan dan antiikatan. Kombinasi sefase menghasilkan orbital ikatan dengan peningkatan kerapatan elektron di antara inti, sedangkan kombinasi berlawanan fase menghasilkan orbital antiikatan yang memiliki simpul di antara inti. Orde ikatan memberi ukuran kualitatif kekuatan dan panjang ikatan.

Dalam praktikum ini, mahasiswa tidak perlu membahas teori orbital molekul H₂ secara mendalam, tetapi harus memahami bahwa panjang ikatan H–H adalah hasil keseimbangan antara tarikan elektron-inti, tolakan inti-inti, dan distribusi elektron dalam molekul. H₂ mengajarkan bahwa ikatan kimia memiliki panjang optimum, bukan jarak sembarang.

Parameter yang dianalisis pada H₂:

Parameter	Makna
H–H awal	Jarak antaratom sebelum optimasi
H–H akhir	Jarak antaratom setelah optimasi
Energi total akhir	Energi struktur teroptimasi
Status konvergensi	Apakah optimasi berhasil
Selisih H–H awal dan akhir	Seberapa besar struktur berubah

Contoh analisis H₂:

Pada struktur awal, jarak H-H dibuat 1,20 Å. Setelah optimasi, jarak H-H berubah menuju nilai yang lebih pendek dan lebih stabil. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal belum berada pada minimum energi. Optimasi menggeser atom H sampai gaya pada atom mendekati nol dan struktur mencapai geometri kesetimbangan menurut metode yang digunakan.

H₂ menjadi latihan awal yang sangat baik sebelum mahasiswa mempelajari molekul triatomik dan poliatomik.

4. H₂O sebagai Model Molekul Bengkok

H₂O adalah molekul triatomik yang sangat penting untuk mempelajari hubungan antara struktur, pasangan elektron bebas, sudut ikatan, dan momen dipol. Dalam teori VSEPR, atom O pada H₂O memiliki dua pasangan elektron ikatan dan dua pasangan elektron bebas. Susunan daerah elektron di sekitar O mendekati tetrahedral, tetapi bentuk molekulnya bengkok karena hanya posisi atom yang dilihat sebagai bentuk molekul.

Parameter utama H₂O adalah:

Parameter	Makna
O–H	Panjang ikatan oksigen-hidrogen
H–O–H	Sudut ikatan
Energi total	Energi geometri hasil optimasi
Konvergensi	Status keberhasilan optimasi

H₂O sangat baik sebagai molekul model karena mahasiswa dapat membandingkan bentuk hasil optimasi dengan prediksi VSEPR. Jika struktur H₂O hasil optimasi mendekati linear, mahasiswa harus curiga. H₂O seharusnya bengkok karena pasangan elektron bebas pada O memengaruhi orientasi ikatan O–H.

Secara konseptual, H₂O mengajarkan bahwa molekul triatomik tidak selalu linear. Rumus molekul H₂O tidak cukup untuk menentukan bentuk. Dua atom H tidak berada pada garis lurus dengan atom O, tetapi membentuk sudut tertentu. Bentuk bengkok ini menyebabkan H₂O memiliki momen dipol permanen. Dengan demikian, geometri H₂O berkaitan langsung dengan sifat fisik dan kimianya.

Dalam optimasi geometri, struktur awal H₂O dapat dibuat dengan sudut yang belum tepat. Software akan mengubah posisi H sampai panjang O–H dan sudut H–O–H mendekati geometri kesetimbangan pada metode yang digunakan. Hasil akhir kemudian dibandingkan dengan prediksi teori VSEPR dan data literatur.

Contoh struktur XYZ awal sederhana untuk H₂O:

```

3
H2O struktur awal
O  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.758000  0.000000  0.504000
H -0.758000  0.000000  0.504000

```

Koordinat ini hanya contoh awal. Struktur akhir harus diperoleh dari optimasi, bukan dianggap benar hanya karena tampak rapi. Mahasiswa harus menghitung O–H dan H–O–H dari koordinat akhir.

H₂O juga mengajarkan pentingnya membedakan **geometri elektron** dan **geometri molekul**. Geometri elektron di sekitar O melibatkan empat daerah elektron, sedangkan geometri molekul hanya memperhitungkan posisi atom. Karena dua daerah elektron merupakan pasangan bebas, bentuk molekul menjadi bengkok.

5. NH₃ sebagai Model Trigonal Piramida

NH₃ adalah molekul yang memperkenalkan bentuk trigonal piramida. Atom N berada di pusat, tiga atom H terikat pada N, dan terdapat satu pasangan elektron bebas pada atom N. Menurut VSEPR, empat daerah elektron di sekitar N tersusun mendekati tetrahedral, tetapi karena satu daerah merupakan pasangan bebas, bentuk molekul yang terlihat adalah trigonal piramida.

Parameter utama NH₃:

Parameter	Makna
N–H	Panjang ikatan nitrogen-hidrogen
H–N–H	Sudut ikatan antarahidrogen
Energi total	Energi struktur akhir
Konvergensi	Status optimasi

NH₃ penting karena memungkinkan mahasiswa membandingkan efek pasangan elektron bebas pada H₂O dan NH₃. H₂O memiliki dua pasangan bebas, sedangkan NH₃ memiliki satu pasangan bebas. Akibatnya, sudut ikatan H–O–H dan H–N–H berbeda. Mahasiswa dapat menganalisis bahwa pasangan elektron bebas memberikan tolakan yang memengaruhi sudut ikatan dan bentuk molekul.

Dalam optimasi geometri NH₃, struktur awal sebaiknya tidak dibuat planar sempurna kecuali dosen memang ingin menunjukkan bahwa optimasi akan mencari bentuk piramida. Jika struktur awal dibuat trigonal planar, software mungkin masih dapat menuju struktur trigonal piramida tergantung metode, simetri input, dan pengaturan optimasi. Namun, untuk praktikum dasar, lebih aman memulai dari bentuk trigonal piramida yang wajar agar optimasi berjalan lancar.

Contoh struktur XYZ awal konseptual NH₃:

4

NH₃ struktur awal

```
N  0.000000  0.000000  0.100000
H  0.940000  0.000000 -0.250000
H -0.470000  0.814000 -0.250000
H -0.470000 -0.814000 -0.250000
```

Koordinat tersebut hanya contoh untuk membangun bentuk piramida. Nilai akhir harus diperoleh dari optimasi.

NH₃ juga menjadi jembatan menuju pembahasan simetri dan momen dipol. Karena bentuknya trigonal piramida dan tidak datar simetris seperti trigonal planar ideal, NH₃ memiliki momen dipol. Pada bab berikutnya, mahasiswa dapat menghubungkan bentuk molekul dengan sifat elektronik.

Secara pedagogis, NH₃ membantu mahasiswa memahami bahwa pasangan elektron bebas tidak terlihat sebagai atom dalam struktur, tetapi efeknya nyata pada bentuk molekul. Inilah salah satu kekuatan optimasi geometri: hasil koordinat atom dapat menunjukkan konsekuensi dari distribusi elektron yang tidak tampak langsung dalam gambar struktur Lewis.

6. CH₄ sebagai Model Tetrahedral

CH₄ adalah molekul model untuk memahami geometri tetrahedral. Atom C berada di pusat dan empat atom H tersusun mengelilinginya secara simetris. Menurut VSEPR, empat pasangan elektron ikatan di sekitar atom C akan menempati susunan yang meminimalkan tolakan, yaitu tetrahedral. Sudut ideal tetrahedral adalah sekitar 109,5°.

Parameter utama CH₄:

Parameter	Makna
C–H	Panjang ikatan karbon-hidrogen
H–C–H	Sudut tetrahedral
Energi total	Energi struktur teroptimasi
Konvergensi	Status optimasi

CH₄ penting karena memperkenalkan konsep simetri tinggi. Semua ikatan C–H setara. Semua sudut H–C–H juga setara dalam geometri ideal. Jika hasil optimasi menghasilkan panjang C–H yang sangat berbeda-beda tanpa alasan, mahasiswa harus memeriksa struktur awal, metode, atau status konvergensi. Dalam molekul sederhana seperti CH₄, hasil optimasi seharusnya menunjukkan kesetaraan geometri yang tinggi.

Contoh struktur XYZ awal konseptual CH₄:

5

CH₄ struktur awal

```
C  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.629000  0.629000  0.629000
H -0.629000 -0.629000  0.629000
```



```

H  -0.629000   0.629000  -0.629000
H   0.629000  -0.629000  -0.629000

```

Koordinat tersebut menunjukkan susunan tetrahedral sederhana. Setelah optimasi, panjang C–H dan sudut H–C–H harus dianalisis.

CH₄ juga membantu mahasiswa memahami perbedaan antara bentuk dua dimensi dan tiga dimensi. Dalam gambar buku, CH₄ sering digambar dengan garis biasa, garis wedge, dan garis dash untuk menunjukkan ruang. Dalam koordinat XYZ, semua atom memiliki posisi tiga dimensi yang eksplisit. Optimasi geometri membuat bentuk tetrahedral dapat dianalisis secara numerik, bukan hanya dilihat secara visual.

Secara kritis, mahasiswa harus memahami bahwa bentuk tetrahedral bukan akibat “keinginan” atom C untuk memiliki bentuk tertentu, tetapi akibat minimisasi energi dan tolakan pasangan elektron dalam susunan tiga dimensi. Optimasi geometri memberi bentuk kuantitatif dari prinsip tersebut.

7. CO₂ sebagai Model Linear

CO₂ adalah molekul model untuk memahami geometri linear. Atom C berada di pusat, dua atom O berada di sisi berlawanan, dan sudut O–C–O mendekati 180°. Menurut VSEPR, atom C dalam CO₂ memiliki dua daerah kerapatan elektron utama, sehingga susunan yang meminimalkan tolakan adalah linear.

Parameter utama CO₂:

Parameter	Makna
C=O	Panjang ikatan karbon-oksigen
O–C–O	Sudut linear
Energi total	Energi struktur akhir
Konvergensi	Status optimasi

CO₂ sangat penting karena menunjukkan bahwa molekul triatomik dapat memiliki bentuk linear, berbeda dari H₂O yang bengkok. Keduanya sama-sama memiliki tiga atom, tetapi bentuknya berbeda karena struktur elektron di sekitar atom pusat berbeda. Perbandingan H₂O dan CO₂ menjadi latihan konseptual yang kuat: jumlah atom sama tidak berarti geometri sama.

Contoh struktur XYZ awal konseptual CO₂:

```

3
CO2 struktur awal
O  -1.160000   0.000000   0.000000
C   0.000000   0.000000   0.000000
O   1.160000   0.000000   0.000000

```

Setelah optimasi, mahasiswa harus memeriksa apakah sudut O–C–O tetap mendekati linear dan apakah dua panjang C=O setara. Jika kedua panjang C=O berbeda jauh pada molekul netral sederhana tanpa alasan, kemungkinan ada kesalahan struktur, input, atau analisis.

CO₂ juga menghubungkan geometri dengan momen dipol. Meskipun ikatan C=O bersifat polar, molekul CO₂ secara keseluruhan tidak memiliki momen dipol permanen karena geometri linear dan simetris menyebabkan dua momen ikatan saling meniadakan. Dengan demikian, geometri tidak hanya menjelaskan bentuk, tetapi juga sifat molekul.

8. Urutan Pedagogis Molekul Model

Kelima molekul model dapat disusun sebagai urutan pembelajaran bertahap.

Urutan	Molekul	Alasan Pedagogis
1	H ₂	Paling sederhana, hanya satu panjang ikatan
2	H ₂ O	Mulai mengenalkan sudut dan bentuk bengkok
3	NH ₃	Mengenalkan trigonal piramida dan pasangan bebas
4	CH ₄	Mengenalkan tetrahedral dan simetri tinggi
5	CO ₂	Mengenalkan linearitas dan simetri triatomik

Urutan ini membantu mahasiswa membangun pemahaman secara bertahap. H₂ memberi dasar panjang ikatan. H₂O memberi dasar sudut ikatan. NH₃ memperkuat peran pasangan bebas. CH₄ memperkenalkan simetri tetrahedral. CO₂ memperlihatkan linearitas dan perbandingan dengan H₂O.

Dosen dapat menggunakan urutan tersebut sebagai alur praktikum. Mahasiswa tidak perlu langsung mengerjakan semua molekul dengan tingkat pembahasan sama. Pada kelas dasar, H₂ dan H₂O dapat dijadikan contoh utama yang dibimbing. NH₃, CH₄, dan CO₂ dapat dijadikan tugas kelompok atau latihan lanjutan.

9. Parameter yang Harus Dianalisis pada Setiap Molekul

Setiap molekul model memiliki parameter analisis yang berbeda. Namun, secara umum, mahasiswa harus menganalisis empat hal:

1. Panjang ikatan.
2. Sudut ikatan.
3. Energi total.
4. Status konvergensi.

Rincian parameter:

Molekul	Panjang Ikatan	Sudut Ikatan	Catatan Analisis
H ₂	H–H	Tidak ada sudut	Fokus pada jarak kesetimbangan
H ₂ O	O–H	H–O–H	Bentuk bengkok
NH ₃	N–H	H–N–H	Trigonal piramida
CH ₄	C–H	H–C–H	Tetrahedral
CO ₂	C=O	O–C–O	Linear

Untuk H₂, tidak ada sudut ikatan karena hanya dua atom. Untuk H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂, sudut ikatan menjadi parameter penting. Pada molekul simetris seperti CH₄ dan CO₂, kesetaraan panjang ikatan juga harus diperiksa.

Mahasiswa perlu membedakan antara parameter yang dihitung dari koordinat dan parameter yang terlihat dari gambar. Gambar membantu pemahaman, tetapi analisis ilmiah harus menggunakan angka.

10. Struktur Awal dan Struktur Akhir

Pada setiap molekul, mahasiswa harus membedakan **struktur awal** dan **struktur akhir**. Struktur awal adalah koordinat yang dibuat sebelum optimasi. Struktur akhir adalah koordinat setelah optimasi konvergen. Keduanya harus dibandingkan.

Perbandingan struktur awal dan akhir dapat dilakukan melalui tabel:

Molekul	Parameter	Nilai Awal	Nilai Akhir	Perubahan
H ₂	H–H	...	...	...
H ₂ O	O–H	...	...	...
H ₂ O	H–O–H	...	...	...

Tujuan perbandingan ini adalah menunjukkan bahwa optimasi mengubah struktur menuju geometri yang lebih stabil. Jika struktur awal sudah sangat baik, perubahan mungkin kecil. Jika struktur awal buruk, perubahan bisa besar. Keduanya dapat menjadi bahan analisis.

Geometri awal yang buruk dapat menyebabkan optimasi gagal atau menuju minimum yang tidak diinginkan; karena itu, pemeriksaan kimiawi terhadap struktur awal, konformasi, dan keadaan spin harus dilakukan sebelum interpretasi hasil.

11. Status Muatan dan Multiplicity Molekul Model

Dalam perhitungan kimia kuantum, setiap molekul harus memiliki muatan total dan multiplicity. Untuk molekul model netral tertutup seperti H₂, H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂, pilihan umum adalah:

$$\text{muatan} = 0$$

multiplicity = 1

Muatan 0 berarti molekul netral. Multiplicity 1 berarti keadaan singlet, yaitu semua elektron berpasangan dalam keadaan dasar tertutup. Pada praktikum dasar, mahasiswa perlu mencatat muatan dan multiplicity karena keduanya memengaruhi perhitungan.

Tabel ringkas:

Molekul	Muatan	Multiplicity Umum
H ₂	0	1
H ₂ O	0	1
NH ₃	0	1
CH ₄	0	1
CO ₂	0	1

Kesalahan dalam muatan atau multiplicity dapat menyebabkan hasil optimasi salah. Misalnya, jika molekul netral dimasukkan sebagai bermuatan, jumlah elektron berubah. Jika multiplicity salah, keadaan elektronik yang dihitung juga salah. Oleh karena itu, muatan dan multiplicity harus dicatat dalam laporan praktikum.

Praktikum ab initio umumnya dimulai dengan penentuan struktur awal, muatan total, multiplicity spin, metode, dan basis set, kemudian dilanjutkan dengan optimasi geometri, pemeriksaan frekuensi, dan analisis sifat.

12. Hubungan Molekul Model dengan Teori VSEPR

Teori VSEPR digunakan sebagai pembandingan kualitatif terhadap hasil optimasi. Teori ini tidak menggantikan perhitungan, tetapi membantu mahasiswa menilai apakah hasil optimasi masuk akal.

Molekul	Prediksi VSEPR	Hasil yang Diharapkan secara Kualitatif
H ₂	Diatomik	Linear karena hanya dua atom
H ₂ O	AX ₂ E ₂	Bengkok
NH ₃	AX ₃ E	Trigonal piramida
CH ₄	AX ₄	Tetrahedral
CO ₂	AX ₂	Linear

Notasi AXE menunjukkan atom pusat A, atom terikat X, dan pasangan elektron bebas E. H₂ tidak menggunakan notasi AXE secara standar karena tidak memiliki atom pusat dalam pengertian molekul poliatomik. H₂O memiliki dua pasangan bebas pada O. NH₃ memiliki satu pasangan bebas pada N. CH₄ tidak memiliki pasangan bebas pada C. CO₂ memiliki dua daerah elektron utama di sekitar C dan berbentuk linear.

Mahasiswa harus memahami bahwa VSEPR memberi bentuk kualitatif, sedangkan optimasi geometri memberi nilai kuantitatif panjang ikatan dan sudut ikatan. Jika hasil komputasi berbeda sedikit dari nilai ideal VSEPR, hal itu wajar. Namun, jika menyimpang besar, mahasiswa harus memeriksa input, metode, basis set, dan konvergensi.

13. Perbandingan dengan Data Literatur

Setelah optimasi selesai, hasil geometri harus dibandingkan dengan data literatur bila tersedia. Perbandingan ini tidak bertujuan membuat mahasiswa menyalahkan hasil komputasi jika tidak sama persis, tetapi mengajarkan validasi ilmiah. Perbedaan antara hasil komputasi dan data rujukan dapat berasal dari metode, basis set, korelasi elektron, efek vibrasi, efek pelarut, dan keterbatasan model.

Dokumen rujukan praktikum menekankan bahwa laporan praktikum perlu memuat perbandingan dengan data eksperimen atau literatur bila tersedia, serta menganalisis perbedaan dari sisi metode, basis set, korelasi elektron, efek pelarut, dan keterbatasan model.

Secara umum, mahasiswa dapat menggunakan data literatur sebagai pembanding untuk:

1. Panjang H–H pada H_2 .
2. Panjang O–H dan sudut H–O–H pada H_2O .
3. Panjang N–H dan sudut H–N–H pada NH_3 .
4. Panjang C–H dan sudut H–C–H pada CH_4 .
5. Panjang C=O dan sudut O–C–O pada CO_2 .

Namun, dosen harus menekankan bahwa nilai literatur dapat berbeda tergantung fase, teknik eksperimen, suhu, dan jenis data yang digunakan. Data microwave, difraksi elektron, spektroskopi, dan hasil komputasi tingkat tinggi dapat memberikan angka yang tidak identik. Karena itu, perbandingan harus dilakukan secara proporsional.

14. Contoh Tabel Rancangan Praktikum Molekul Model

Mahasiswa dapat menggunakan tabel rancangan berikut sebelum menjalankan optimasi.

Molekul	Struktur Awal	Job	Parameter Utama	Teori Pembanding
H_2	Dua atom H	Optimasi geometri	H–H	Energi minimum ikatan
H_2O	O pusat, dua H	Optimasi geometri	O–H, H–O–H	VSEPR bengkok

NH ₃	N pusat, tiga H	Optimasi geometri	N–H, H–N–H	VSEPR trigonal piramida
CH ₄	C pusat, empat H	Optimasi geometri	C–H, H–C–H	VSEPR tetrahedral
CO ₂	O–C–O	Optimasi geometri	C=O, O–C–O	VSEPR linear

Tabel ini dapat ditempatkan dalam buku kerja praktikum atau laporan awal. Dengan tabel ini, mahasiswa mengetahui sejak awal apa yang harus diamati pada setiap molekul.

15. Contoh Penamaan File untuk Molekul Model

Agar file praktikum tertib, setiap molekul sebaiknya memiliki nama file yang konsisten.

Contoh:

```
input/h2_awal.xyz
input/h2o_awal.xyz
input/nh3_awal.xyz
input/ch4_awal.xyz
input/co2_awal.xyz
```

Output optimasi:

```
output/h2_optimasi.out
output/h2o_optimasi.out
output/nh3_optimasi.out
output/ch4_optimasi.out
output/co2_optimasi.out
```

Koordinat akhir:

```
output/h2_akhir.xyz
output/h2o_akhir.xyz
output/nh3_akhir.xyz
output/ch4_akhir.xyz
output/co2_akhir.xyz
```

Nama file yang rapi membantu Python membaca data secara sistematis pada subbab 5.6. Jika nama file tidak konsisten, analisis otomatis menjadi sulit. Kebiasaan penamaan file yang baik juga memperkuat reproduktibilitas praktikum.

16. Analisis Kritis terhadap Molekul Model

Meskipun molekul model dalam praktikum ini sederhana, mahasiswa tetap harus menganalisisnya secara kritis. Kesederhanaan molekul tidak berarti hasil otomatis benar. Beberapa potensi masalah tetap dapat muncul.

Pertama, struktur awal dapat salah. Misalnya, H_2O dibuat linear, NH_3 dibuat planar, atau CH_4 dibuat dalam bentuk datar. Optimasi mungkin memperbaiki sebagian kesalahan, tetapi tidak selalu berhasil jika simetri input atau parameter menghambat perubahan geometri.

Kedua, metode komputasi dapat memengaruhi hasil. HF/STO-3G, semiempiris, DFT dengan basis kecil, dan DFT dengan basis lebih besar dapat menghasilkan panjang ikatan dan sudut ikatan yang berbeda. Karena itu, hasil harus selalu dilaporkan bersama metode.

Ketiga, konvergensi harus diperiksa. Struktur akhir yang tidak konvergen belum boleh langsung dibandingkan dengan literatur. Konvergensi SCF dan konvergensi optimasi harus dibaca secara kritis sebelum interpretasi kimia dilakukan.

Keempat, hasil visual dapat menipu. Molekul yang tampak benar dalam visualizer belum tentu memiliki parameter numerik yang benar. Karena itu, panjang ikatan dan sudut ikatan harus dihitung.

Kelima, VSEPR bersifat kualitatif. Jika hasil optimasi tidak sama persis dengan sudut ideal, belum tentu salah. Yang penting adalah pola geometri: H_2O bengkok, NH_3 trigonal piramida, CH_4 tetrahedral, dan CO_2 linear.

17. Implikasi Pembelajaran dari Molekul Model

Molekul model pada subbab ini memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar memahami geometri molekul dari koordinat, bukan hanya dari gambar. Kedua, mahasiswa belajar bahwa bentuk molekul dapat diperoleh melalui proses energi minimum. Ketiga, mahasiswa belajar membandingkan hasil komputasi dengan teori VSEPR. Keempat, mahasiswa belajar bahwa setiap molekul memiliki parameter analisis yang berbeda. Kelima, mahasiswa mulai memahami hubungan antara geometri dan sifat molekul.

H_2 mengajarkan konsep jarak ikatan. H_2O mengajarkan bentuk bengkok dan momen dipol. NH_3 mengajarkan pengaruh pasangan elektron bebas. CH_4 mengajarkan tetrahedral dan simetri. CO_2 mengajarkan linearitas dan pembatalan momen dipol. Dengan demikian, satu praktikum dapat membangun fondasi geometri molekul yang kuat.

Molekul-molekul ini juga menjadi dasar untuk praktikum berikutnya. Setelah mahasiswa mampu mengoptimasi geometri H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 , mereka akan lebih siap menghitung frekuensi vibrasi, momen dipol, energi orbital, dan sifat elektronik lain. Geometri yang baik adalah fondasi untuk semua perhitungan lanjutan.

18. Transisi ke Jalur ChemCompute

Setelah molekul model ditetapkan, subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Pada subbab 5.5, mahasiswa akan diarahkan untuk membuat struktur awal, menjalankan optimasi geometri dengan GAMESS melalui ChemCompute, dan mengunduh file output. Molekul model H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 akan menjadi sistem latihan dalam jalur tersebut.

Dengan memahami peran setiap molekul pada subbab ini, mahasiswa akan lebih siap menjalankan optimasi secara terarah. Mereka tidak hanya menjalankan job, tetapi mengetahui parameter apa yang harus diperiksa: H–H untuk H_2 , O–H dan H–O–H untuk H_2O , N–H dan H–N–H untuk NH_3 , C–H dan H–C–H untuk CH_4 , serta C=O dan O–C–O untuk CO_2 .

5.5 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute adalah prosedur praktikum optimasi geometri yang menggunakan platform berbasis web untuk menjalankan perhitungan kimia komputasi, terutama dengan GAMESS, tanpa mahasiswa harus menginstal paket kimia kuantum secara lokal. Dalam Praktikum 2, jalur ini digunakan agar mahasiswa dapat membuat struktur awal molekul, menjalankan optimasi geometri, memeriksa status perhitungan, mengunduh file output, lalu menganalisis geometri akhir menggunakan Python.

Pada jalur ini, ChemCompute berperan sebagai **laboratorium komputasi berbasis web**, sedangkan GAMESS berperan sebagai **mesin perhitungan struktur elektronik**. Mahasiswa tidak perlu mengatur instalasi GAMESS di komputer pribadi, tetapi tetap harus memahami input, metode, basis set, muatan, multiplicity, energi total, koordinat akhir, dan status konvergensi. Dengan demikian, jalur ChemCompute bukan sekadar jalur cepat untuk memperoleh hasil, melainkan sarana untuk mempelajari alur kerja kimia komputasi secara utuh.

Dalam rujukan pembelajaran kimia komputasi yang digunakan dalam buku ini, ChemCompute dijelaskan sebagai platform yang memindahkan komputasi dari komputer lokal ke server jarak jauh melalui web, sehingga mahasiswa dapat menjalankan paket seperti GAMESS atau NWChem tanpa instalasi Linux yang kompleks. Antarmuka ChemCompute juga memungkinkan mahasiswa memilih metode, mengirim job ke server, dan menerima hasil melalui browser, sehingga hambatan teknis praktikum dapat dikurangi.

1. Pengertian Jalur ChemCompute dalam Praktikum Optimasi Geometri

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 2 adalah rangkaian kerja berikut:

```
membuat struktur awal
→ memilih jenis perhitungan optimasi geometri
→ memilih metode dan basis set
→ mengatur muatan dan multiplicity
→ menjalankan job GAMESS melalui ChemCompute
→ memantau status job
```


- mengunduh file output
- mengambil koordinat akhir
- menganalisis panjang ikatan dan sudut ikatan dengan Python

Jalur ini menempatkan ChemCompute sebagai penghubung antara mahasiswa dan perangkat lunak kimia kuantum. Mahasiswa tetap melakukan pekerjaan ilmiah: menyiapkan struktur, memilih parameter, membaca output, memeriksa konvergensi, dan menafsirkan hasil. ChemCompute hanya mengurangi beban instalasi dan manajemen komputasi lokal.

Perlu ditegaskan bahwa ChemCompute bukan metode komputasi. ChemCompute adalah platform. Metode komputasi tetap ditentukan oleh pilihan seperti Hartree–Fock, DFT, semiempiris, atau metode lain yang tersedia. Basis set juga harus dipilih secara eksplisit. GAMESS atau paket lain melakukan perhitungan berdasarkan metode dan basis set tersebut. Oleh karena itu, laporan tidak boleh hanya menulis “perhitungan dilakukan dengan ChemCompute.” Laporan harus mencantumkan platform, software, metode, basis set, muatan, multiplicity, dan jenis job.

Contoh penulisan yang benar:

Optimasi geometri H₂O dilakukan melalui platform ChemCompute menggunakan GAMESS dengan metode HF dan basis set STO-3G. Muatan total molekul adalah 0 dan multiplicity adalah 1. Hasil optimasi dianalisis berdasarkan koordinat akhir, energi total, dan status konvergensi.

Contoh penulisan yang kurang lengkap:

Optimasi dilakukan dengan ChemCompute.

Pernyataan kedua kurang memadai karena tidak menjelaskan metode, basis set, dan software komputasi yang sebenarnya menjalankan perhitungan.

2. Kedudukan ChemCompute dalam Alur Praktikum

Dalam Praktikum 2, ChemCompute berada pada tahap **eksekusi perhitungan**. Struktur awal dapat dibuat di Avogadro atau editor molekul yang tersedia. Setelah struktur siap, struktur tersebut dipakai sebagai input untuk optimasi geometri. ChemCompute kemudian menjalankan job dan menghasilkan file output.

Secara umum, alur praktikum dapat ditulis sebagai berikut:

- Avogadro
- membuat struktur awal molekul
 - menyimpan file XYZ
- ChemCompute/GAMESS
- menjalankan optimasi geometri
 - menghasilkan output

Python

- membaca koordinat awal dan akhir
- menghitung panjang ikatan
- menghitung sudut ikatan
- membuat tabel geometri
- membuat plot struktur 3D sederhana
- membandingkan geometri awal dan akhir

Alur ini penting karena setiap software memiliki fungsi berbeda. Avogadro tidak menggantikan optimasi geometri kuantum. ChemCompute tidak menggantikan analisis geometri. GAMESS tidak otomatis membuat laporan. Python tidak menjalankan job GAMESS dalam jalur ini, tetapi menganalisis data hasilnya. Dengan pembagian peran tersebut, mahasiswa memahami bahwa kimia komputasi adalah workflow, bukan sekadar penggunaan satu aplikasi.

3. Persiapan Sebelum Menggunakan ChemCompute

Sebelum masuk ke ChemCompute, mahasiswa harus menyiapkan beberapa hal.

Pertama, mahasiswa harus menentukan molekul yang akan dioptimasi. Dalam Praktikum 2, molekul model adalah H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 . Setiap molekul memiliki parameter analisis berbeda: H_2 fokus pada panjang H–H, H_2O pada O–H dan H–O–H, NH_3 pada N–H dan H–N–H, CH_4 pada C–H dan H–C–H, serta CO_2 pada C=O dan O–C–O.

Kedua, mahasiswa harus menyiapkan struktur awal. Struktur awal dapat dibuat di Avogadro, kemudian disimpan sebagai file XYZ. File awal sebaiknya diberi nama rapi:

```
input/h2_awal.xyz
input/h2o_awal.xyz
input/nh3_awal.xyz
input/ch4_awal.xyz
input/co2_awal.xyz
```

Ketiga, mahasiswa harus menentukan muatan dan multiplicity. Untuk molekul netral tertutup dalam praktikum ini, nilai umum yang digunakan adalah:

```
muatan = 0
multiplicity = 1
```

Keempat, mahasiswa harus menentukan metode dan basis set. Untuk praktikum dasar, dosen dapat menggunakan metode sederhana seperti HF/STO-3G agar perhitungan cepat. Jika fasilitas dan waktu memungkinkan, dosen dapat memperkenalkan basis set yang lebih besar atau metode DFT. Namun, untuk praktikum awal, yang paling penting adalah mahasiswa memahami prosedur optimasi, bukan mengejar hasil paling akurat.

Kelima, mahasiswa harus menyiapkan folder kerja:

```
praktikum_02_optimasi_geometri/
```

```

├── input/
├── output/
├── python/
├── data/
├── gambar/
└── laporan/

```

Folder ini membantu menjaga file input, output, data, gambar, kode, dan laporan tetap tertib. Reprodusibilitas perhitungan sangat bergantung pada kerapian penyimpanan input, parameter, output, dan analisis. Rujukan praktikum menekankan bahwa hasil komputasi perlu memuat input lengkap, versi program, parameter, dan output agar dapat direplikasi.

4. Membuat Struktur Awal Molekul

Langkah pertama dalam jalur ChemCompute adalah membuat struktur awal molekul. Struktur awal adalah tebakan koordinat atom sebelum optimasi. Struktur ini dapat dibuat menggunakan Avogadro atau editor molekul lain. Pada prinsipnya, struktur awal harus cukup masuk akal agar optimasi dapat berjalan efisien.

Untuk H_2 , struktur awal cukup berupa dua atom H dengan jarak tertentu. Untuk H_2O , atom O menjadi pusat dengan dua atom H membentuk struktur bengkok. Untuk NH_3 , atom N menjadi pusat dengan tiga atom H membentuk struktur trigonal piramida. Untuk CH_4 , atom C menjadi pusat dengan empat atom H membentuk tetrahedral. Untuk CO_2 , atom C berada di tengah dan dua atom O berada pada garis lurus.

Contoh struktur awal H_2O dalam format XYZ:

```

3
H2O struktur awal
O  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.758000  0.000000  0.504000
H -0.758000  0.000000  0.504000

```

Struktur ini bukan hasil akhir. Struktur ini hanya tebakan awal. Setelah optimasi, koordinat atom dapat berubah. Mahasiswa harus membedakan dengan jelas antara file `h2o_awal.xyz` dan `h2o_akhir.xyz`.

Kesalahan umum pada tahap ini adalah membuat struktur yang secara kimia tidak masuk akal. Misalnya, H_2O dibuat linear, CH_4 dibuat datar, atau atom-atom diletakkan terlalu dekat. Struktur awal yang buruk dapat membuat optimasi gagal, lambat, atau menghasilkan struktur akhir yang tidak diinginkan. Oleh karena itu, sebelum mengirim job ke ChemCompute, mahasiswa harus memeriksa struktur awal secara visual dan kimiawi.

5. Memilih Jenis Perhitungan: Optimasi Geometri

Setelah struktur awal siap, mahasiswa memilih jenis perhitungan **optimasi geometri**. Dalam banyak software, job ini biasanya diberi nama OPT, Geometry Optimization, Optimize Geometry, atau istilah sejenis. Tujuan job ini adalah mengubah koordinat atom secara iteratif sampai struktur memenuhi kriteria konvergensi.

Mahasiswa harus memahami bahwa optimasi geometri berbeda dari perhitungan energi tunggal atau **single point energy**. Perhitungan single point hanya menghitung energi pada struktur yang diberikan tanpa mengubah geometri. Optimasi geometri menghitung energi berkali-kali sambil memperbarui struktur.

Perbedaannya dapat diringkas sebagai berikut:

Jenis Job	Fungsi	Apakah Geometri Berubah?
Single point energy	Menghitung energi pada struktur tertentu	Tidak
Geometry optimization	Mencari struktur dengan energi lebih rendah	Ya
Frequency calculation	Menghitung frekuensi vibrasi dan memeriksa minimum	Tidak, kecuali dikombinasi
Optimization + frequency	Mengoptimasi lalu memvalidasi minimum	Ya, lalu analisis vibrasi

Dalam Praktikum 2, job utama adalah **geometry optimization**. Jika dosen ingin memperluas validasi, optimasi dapat dilanjutkan dengan perhitungan frekuensi. Namun, fokus utama subbab ini adalah menjalankan optimasi dan mengunduh output.

6. Memilih Metode dan Basis Set

Setelah jenis job ditentukan, mahasiswa memilih metode dan basis set. Metode menentukan pendekatan perhitungan energi elektronik, sedangkan basis set menentukan fungsi matematika yang digunakan untuk merepresentasikan orbital atom atau orbital molekul.

Contoh metode dan basis set untuk praktikum dasar:

```
Metode   : Hartree-Fock
Basis    : STO-3G
```

Pilihan ini sederhana dan cepat, tetapi akurasinya terbatas. Untuk pembelajaran awal, HF/STO-3G dapat digunakan untuk memahami alur optimasi. Jika kelas lebih lanjut, dosen dapat memilih metode DFT seperti B3LYP dengan basis set 6-31G(d), jika tersedia dan sesuai dengan kapasitas platform.

Mahasiswa harus memahami bahwa metode dan basis set memengaruhi hasil geometri. Panjang ikatan dan sudut ikatan dari HF/STO-3G dapat berbeda dari hasil B3LYP/6-31G(d). Perbedaan tersebut bukan sekadar kesalahan, tetapi konsekuensi dari model teori yang berbeda. Karena itu, laporan harus mencantumkan metode dan basis set agar hasil dapat ditafsirkan dengan benar.

Contoh penulisan metadata:

```
Molekul      : NH3
Job          : Optimasi geometri
Software     : GAMESS melalui ChemCompute
Metode       : HF
Basis set    : STO-3G
Muatan       : 0
Multiplicity  : 1
```

Metadata seperti ini harus dicatat sebelum hasil dianalisis.

7. Mengatur Muatan dan Multiplicity

Muatan dan multiplicity adalah parameter wajib dalam perhitungan kimia kuantum. Muatan menunjukkan jumlah elektron total relatif terhadap molekul netral. Multiplicity menunjukkan keadaan spin sistem dan dihitung dari:

$$\text{multiplicity} = 2S + 1$$

dengan S adalah spin total.

Untuk molekul model netral tertutup pada praktikum ini, nilai umum adalah:

Molekul	Muatan	Multiplicity
H ₂	0	1
H ₂ O	0	1
NH ₃	0	1
CH ₄	0	1
CO ₂	0	1

Kesalahan muatan atau multiplicity dapat merusak hasil perhitungan. Jika molekul netral dimasukkan sebagai bermuatan, jumlah elektron berubah. Jika multiplicity salah, software dapat menghitung keadaan elektronik yang tidak sesuai. Karena itu, mahasiswa harus selalu memeriksa bagian ini sebelum job dikirim.

Dalam laporan, muatan dan multiplicity tidak boleh dihilangkan. Keduanya merupakan bagian dari identitas perhitungan.

8. Menjalankan Job Optimasi

Setelah struktur, metode, basis set, muatan, multiplicity, dan jenis job ditentukan, mahasiswa dapat menjalankan job optimasi. ChemCompute akan mengirim perhitungan ke server dan menampilkan status job. Mahasiswa perlu menunggu sampai perhitungan selesai.

Pada molekul kecil seperti H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 , perhitungan biasanya relatif cepat pada metode sederhana. Namun, mahasiswa tetap harus memahami bahwa waktu perhitungan bergantung pada metode, basis set, ukuran molekul, dan beban server. Jika perhitungan tidak selesai, mahasiswa tidak boleh langsung menyimpulkan software bermasalah. Perlu diperiksa apakah input benar, apakah pilihan metode tersedia, apakah struktur awal masuk akal, dan apakah status server memungkinkan.

Selama proses ini, mahasiswa perlu mencatat:

1. Nama molekul.
2. Nama job.
3. Waktu pengiriman job.
4. Software yang digunakan.
5. Metode dan basis set.
6. Status job.
7. Nama file output yang diunduh.

Catatan ini berguna jika job perlu diulang.

9. Mengunduh File Output

Setelah job selesai, mahasiswa harus mengunduh file output. File output adalah dokumen utama yang berisi hasil perhitungan. Output tidak boleh hanya dilihat di layar lalu ditinggalkan. File output harus disimpan dalam folder `output/`.

Nama file output yang disarankan:

```
output/h2_optimasi.out  
output/h2o_optimasi.out  
output/nh3_optimasi.out  
output/ch4_optimasi.out  
output/co2_optimasi.out
```

Jika ChemCompute memberi ekstensi atau format tertentu, mahasiswa dapat menyesuaikan, tetapi nama file harus tetap informatif. File output harus disimpan bersama file input dan laporan agar hasil dapat diperiksa ulang.

Output ChemCompute/GAMESS biasanya berisi banyak bagian. Mahasiswa harus mencari bagian penting:

1. Informasi metode dan basis set.
2. Muatan dan multiplicity.
3. Energi total.
4. Iterasi optimasi.
5. Koordinat akhir.
6. Status konvergensi.
7. Pesan error jika ada.

Rujukan pembelajaran komputasi menekankan bahwa manajemen data output menjadi tantangan dalam model cloud; file seperti data termodinamika atau koordinat XYZ perlu diunduh dan digunakan kembali untuk analisis di Jupyter/Python. Karena itu, tahap mengunduh output merupakan bagian penting dari praktikum, bukan sekadar tindakan administratif.

10. Memeriksa Status Konvergensi

Setelah output diunduh, langkah pertama yang harus dilakukan adalah memeriksa status konvergensi. Mahasiswa tidak boleh langsung mengambil koordinat akhir tanpa memeriksa apakah optimasi berhasil.

Optimasi dianggap berhasil jika output menyatakan bahwa kriteria optimasi telah terpenuhi. Format pernyataan konvergensi dapat berbeda antarsoftware, tetapi prinsipnya sama: perubahan energi, gaya, dan perpindahan atom sudah berada dalam batas yang diterima.

Jika output menunjukkan bahwa optimasi tidak konvergen, maka koordinat terakhir belum boleh diperlakukan sebagai geometri kesetimbangan. Mahasiswa harus melaporkan bahwa optimasi belum konvergen dan mendiskusikan kemungkinan penyebabnya.

Kemungkinan penyebab optimasi tidak konvergen:

1. Struktur awal terlalu buruk.
2. Metode atau basis set tidak cocok.
3. Batas iterasi terlalu kecil.
4. SCF tidak konvergen.
5. Molekul dimasukkan dengan muatan atau multiplicity salah.
6. Ada kesalahan input.
7. Server menghentikan job karena batas waktu atau sumber daya.

Dalam praktikum dasar, jika optimasi gagal, mahasiswa dapat memperbaiki struktur awal di Avogadro, menggunakan metode lebih sederhana, atau meminta arahan dosen. Yang terpenting, mahasiswa belajar bahwa output harus dibaca secara kritis.

11. Mengambil Koordinat Akhir

Setelah status konvergensi dipastikan, mahasiswa mengambil koordinat akhir dari file output. Koordinat akhir ini harus disimpan sebagai file XYZ baru, misalnya:

```
output/h2_akhir.xyz
output/h2o_akhir.xyz
output/nh3_akhir.xyz
output/ch4_akhir.xyz
output/co2_akhir.xyz
```

Koordinat akhir ini akan digunakan pada subbab 5.6 untuk analisis Python. Mahasiswa harus memastikan bahwa urutan atom dalam koordinat akhir jelas. Jika urutan atom berubah, analisis panjang ikatan dan sudut ikatan harus menyesuaikan.

Contoh format koordinat akhir H₂O:

```
3
H2O koordinat akhir hasil optimasi
O      x1      y1      z1
H      x2      y2      z2
H      x3      y3      z3
```

Nilai x, y, z harus diisi berdasarkan output optimasi. Mahasiswa tidak boleh membuat nilai koordinat akhir secara manual tanpa dasar output.

Koordinat akhir adalah jembatan antara perhitungan ChemCompute dan analisis Python. Jika koordinat akhir salah disalin, seluruh analisis panjang ikatan dan sudut ikatan akan salah. Oleh karena itu, tahap ini harus dilakukan hati-hati.

12. Menyusun File Awal dan Akhir untuk Analisis Python

Agar subbab 5.6 dapat dijalankan dengan baik, mahasiswa harus menyediakan dua jenis file untuk setiap molekul:

1. File struktur awal.
2. File struktur akhir.

Contoh untuk H₂O:

```
input/h2o_awal.xyz
output/h2o_akhir.xyz
```

Dengan dua file tersebut, Python dapat menghitung parameter awal dan akhir, lalu membuat tabel perbandingan.

Struktur folder ideal setelah jalur ChemCompute:

```
praktikum_02_optimasi_geometri/
├── input/
│   ├── h2_awal.xyz
│   ├── h2o_awal.xyz
│   ├── nh3_awal.xyz
│   ├── ch4_awal.xyz
│   └── co2_awal.xyz
├── output/
│   ├── h2_optimasi.out
│   ├── h2o_optimasi.out
│   ├── nh3_optimasi.out
│   ├── ch4_optimasi.out
│   ├── co2_optimasi.out
│   ├── h2_akhir.xyz
│   ├── h2o_akhir.xyz
│   ├── nh3_akhir.xyz
│   ├── ch4_akhir.xyz
│   └── co2_akhir.xyz
├── python/
├── data/
├── gambar/
└── laporan/
```

Struktur ini akan memudahkan analisis otomatis pada subbab berikutnya.

13. Contoh Alur Praktikum untuk H₂O

Sebagai contoh konkret, berikut alur jalur ChemCompute untuk H₂O.

Langkah 1 — Membuat struktur awal

Mahasiswa membuat H₂O di Avogadro, memastikan bentuknya bengkok, lalu menyimpan file sebagai:

```
input/h2o_awal.xyz
```

Langkah 2 — Mengunggah atau memasukkan struktur ke ChemCompute

Struktur H₂O dimasukkan ke ChemCompute sebagai struktur awal. Mahasiswa memeriksa bahwa jumlah atom benar, yaitu 3 atom: satu O dan dua H.

Langkah 3 — Memilih perhitungan

Mahasiswa memilih job optimasi geometri dengan GAMESS.

Langkah 4 — Menentukan parameter

Contoh parameter:

```
Metode      : HF
Basis set   : STO-3G
Muatan      : 0
Multiplicity : 1
Job         : Geometry Optimization
```

Langkah 5 — Menjalankan job

Mahasiswa mengirim job dan menunggu sampai selesai.

Langkah 6 — Mengunduh output

File output disimpan sebagai:

```
output/h2o_optimasi.out
```

Langkah 7 — Memeriksa konvergensi

Mahasiswa mencari bagian output yang menunjukkan optimasi berhasil. Jika belum konvergen, hasil tidak boleh langsung dianalisis sebagai geometri akhir.

Langkah 8 — Mengambil koordinat akhir

Koordinat akhir disimpan sebagai:

```
output/h2o_akhir.xyz
```

Langkah 9 — Analisis Python

Pada subbab 5.6, Python digunakan untuk menghitung panjang O–H, sudut H–O–H, dan membandingkan struktur awal dengan struktur akhir.

14. Contoh Alur Praktikum untuk CO₂

CO₂ memberikan contoh berbeda karena bentuknya linear. Jalur ChemCompute untuk CO₂ dapat dilakukan sebagai berikut.

Langkah 1 — Membuat struktur awal linear

Contoh struktur awal:

```
3
CO2 awal
O -1.160000  0.000000  0.000000
```

```
C  0.000000  0.000000  0.000000
O  1.160000  0.000000  0.000000
```

Langkah 2 — Memilih job optimasi

Job yang dipilih adalah optimasi geometri.

Langkah 3 — Mengatur parameter

```
Metode      : HF
Basis set   : STO-3G
Muatan      : 0
Multiplicity : 1
```

Langkah 4 — Mengunduh output

Output disimpan sebagai:

```
output/co2_optimasi.out
```

Langkah 5 — Mengambil koordinat akhir

Koordinat akhir disimpan sebagai:

```
output/co2_akhir.xyz
```

Langkah 6 — Analisis

Mahasiswa memeriksa panjang C=O dan sudut O–C–O. Struktur akhir seharusnya tetap linear secara kualitatif. Jika sudut jauh dari 180° tanpa alasan, mahasiswa perlu memeriksa input, konvergensi, dan koordinat.

15. Hal yang Harus Dicatat dalam Laporan

Setiap perhitungan melalui ChemCompute harus dicatat dengan lengkap. Format catatan minimal:

```
Molekul      : H2O
Platform     : ChemCompute
Software perhitungan : GAMESS
Jenis job    : Optimasi geometri
Metode       : HF
Basis set    : STO-3G
Muatan       : 0
Multiplicity : 1
File struktur awal : input/h2o_awal.xyz
File output     : output/h2o_optimasi.out
File koordinat akhir : output/h2o_akhir.xyz
Status optimasi  : Konvergen / Tidak konvergen
```

Energi total akhir : ... Hartree

Catatan ini harus dibuat untuk setiap molekul. Dengan catatan tersebut, dosen dapat memeriksa kembali jalur kerja mahasiswa. Mahasiswa juga dapat menelusuri hasil jika terjadi kesalahan.

16. Validasi Hasil Jalur ChemCompute

Validasi hasil jalur ChemCompute mencakup beberapa pemeriksaan.

Pertama, validasi jumlah atom. File awal dan akhir harus memiliki jumlah atom yang sama. H₂ harus memiliki 2 atom, H₂O 3 atom, NH₃ 4 atom, CH₄ 5 atom, dan CO₂ 3 atom.

Kedua, validasi muatan dan multiplicity. Semua molekul model dalam praktikum dasar ini umumnya menggunakan muatan 0 dan multiplicity 1.

Ketiga, validasi status konvergensi. Output harus menunjukkan optimasi selesai dengan baik. Jika tidak, hasil harus ditandai sebagai tidak konvergen.

Keempat, validasi geometri kualitatif. H₂ tetap diatomik, H₂O bengkok, NH₃ trigonal piramida, CH₄ tetrahedral, dan CO₂ linear.

Kelima, validasi parameter geometri. Panjang ikatan dan sudut ikatan harus masuk akal jika dibandingkan dengan teori dan literatur. Dokumen rujukan praktikum menekankan bahwa hasil komputasi perlu ditafsirkan secara kimia, bukan hanya dilaporkan sebagai angka, dan laporan sebaiknya memuat perbandingan eksperimen atau literatur jika tersedia.

17. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah sebagai berikut.

Kesalahan	Dampak
Struktur awal salah	Optimasi gagal atau hasil tidak wajar
Muatan salah	Jumlah elektron salah
Multiplicity salah	Keadaan spin salah
Salah memilih job	Hanya single point, bukan optimasi
Tidak mengunduh output	Hasil tidak dapat diperiksa ulang
Tidak memeriksa konvergensi	Geometri akhir bisa tidak sah
Salah menyalin koordinat akhir	Analisis Python salah
Tidak mencatat metode/basis	Hasil tidak dapat ditafsirkan
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Laporan kehilangan konteks ilmiah
Menghapus file job lama tanpa arsip	Reprodusibilitas hilang

Kesalahan-kesalahan tersebut sering terjadi bukan karena konsep sulit, tetapi karena prosedur tidak tertib. Oleh sebab itu, mahasiswa harus menggunakan checklist sebelum menyusun laporan.

18. Checklist Jalur ChemCompute

Checklist berikut dapat digunakan sebelum melanjutkan ke analisis Python.

- [] Struktur awal dibuat dengan benar.
- [] File XYZ awal disimpan di folder input/.
- [] Molekul yang dipilih sesuai daftar praktikum.
- [] Job yang dipilih adalah optimasi geometri.
- [] Software perhitungan dicatat.
- [] Metode dicatat.
- [] Basis set dicatat.
- [] Muatan dicatat.
- [] Multiplicity dicatat.
- [] Job berhasil dikirim.
- [] File output diunduh.
- [] File output disimpan di folder output/.
- [] Status konvergensi diperiksa.
- [] Energi total akhir dicatat.
- [] Koordinat akhir diambil dari output.
- [] File XYZ akhir disimpan.
- [] Struktur akhir masuk akal secara kimia.

Checklist ini membantu mahasiswa bekerja tertib dan mencegah kehilangan data.

19. Analisis Kritis terhadap Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki kelebihan yang besar dalam pendidikan kimia komputasi. Pertama, jalur ini menurunkan hambatan instalasi. Mahasiswa tidak harus mengatur GAMESS secara lokal. Kedua, jalur ini cocok untuk kelas besar. Ketiga, mahasiswa dapat mengalami proses job submission, pemantauan job, dan pengunduhan output. Keempat, jalur ini memungkinkan dosen memperkenalkan kimia komputasi tanpa infrastruktur lokal yang berat.

Namun, jalur ini juga memiliki batas. Pertama, mahasiswa dapat menjadi terlalu bergantung pada antarmuka grafis. Mereka mungkin tidak memahami input yang sebenarnya dijalankan. Kedua, pilihan metode dan basis set dapat terbatas. Ketiga, akses bergantung pada internet dan server. Keempat, mahasiswa dapat lupa mengunduh output atau menyimpan file secara tertib. Kelima, karena proses tampak mudah, mahasiswa dapat mengabaikan pemeriksaan konvergensi.

Oleh karena itu, jalur ChemCompute harus selalu dilengkapi dengan analisis output dan pascaproses Python. Mahasiswa harus melihat ChemCompute sebagai pintu masuk ke kimia komputasi, bukan sebagai pengganti pemahaman. Hasil dari ChemCompute harus dibaca, disimpan, dianalisis, dan dibandingkan dengan teori.

20. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki implikasi pedagogis penting. Mahasiswa dapat memusatkan perhatian pada konsep optimasi geometri tanpa terlalu terbebani masalah instalasi. Mereka belajar bahwa struktur awal harus dioptimasi. Mereka belajar bahwa output harus diunduh. Mereka belajar bahwa konvergensi harus diperiksa. Mereka belajar bahwa koordinat akhir harus dianalisis. Mereka juga belajar bahwa komputasi modern sering dilakukan melalui platform jarak jauh.

Namun, kemudahan akses harus diseimbangkan dengan kedisiplinan ilmiah. Setiap job harus dicatat. Setiap output harus disimpan. Setiap geometri akhir harus divalidasi. Setiap laporan harus menyebutkan metode, basis set, muatan, multiplicity, energi total, dan status konvergensi.

Dengan cara ini, jalur ChemCompute tidak hanya mempercepat praktikum, tetapi membangun kebiasaan kerja kimia komputasi yang benar.

21. Transisi ke Jalur Python Mandiri

Setelah mahasiswa menjalankan optimasi geometri melalui ChemCompute dan mengunduh file output, langkah berikutnya adalah melakukan analisis geometri menggunakan Python. Subbab 5.6 akan membahas jalur Python mandiri. Pada jalur tersebut, mahasiswa akan membaca koordinat XYZ, menghitung jarak antaratom, menghitung sudut ikatan, membuat tabel geometri, membuat plot struktur sederhana 3D, dan membandingkan geometri awal serta akhir.

Dengan demikian, ChemCompute menghasilkan data optimasi, sedangkan Python mengubah data tersebut menjadi tabel, grafik, dan analisis kuantitatif. Keduanya saling melengkapi dalam alur Praktikum 2.

5.6 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri dalam Praktikum 2 adalah tahap analisis pascaproses terhadap hasil optimasi geometri. Pada jalur ini, Python tidak ditempatkan sebagai pengganti ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau Psi4, melainkan sebagai alat untuk membaca koordinat molekul, menghitung parameter geometri, membuat tabel, memvisualisasikan struktur, serta membandingkan struktur awal dan struktur akhir. Dengan demikian, Python berperan sebagai **alat analisis geometri yang transparan, reproduibel, dan dapat diperiksa ulang**.

Jika pada subbab 5.5 mahasiswa menjalankan optimasi geometri melalui ChemCompute/GAMESS dan mengunduh output, maka pada subbab 5.6 mahasiswa mengolah hasil tersebut menjadi data geometri yang terstruktur. File output optimasi biasanya memuat koordinat akhir, energi total, dan status konvergensi. Namun, laporan praktikum tidak cukup hanya menampilkan file output. Mahasiswa perlu mengubah koordinat menjadi informasi kimia yang bermakna: panjang ikatan, sudut ikatan, perubahan geometri, dan visualisasi struktur.

Secara teoritis, analisis ini berangkat dari kenyataan bahwa koordinat molekul dapat ditulis sebagai koordinat Kartesius atau koordinat internal seperti panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut dihedral. Optimasi geometri mencari koordinat inti yang membuat gradien energi mendekati nol dan struktur berada pada minimum lokal permukaan energi potensial. Karena itu, Python digunakan untuk menerjemahkan koordinat Kartesius hasil optimasi menjadi parameter internal yang lebih mudah ditafsirkan secara kimia.

Kode Python pada jalur mandiri ini wajib memuat enam komponen:

1. **Pembacaan koordinat XYZ.**
2. **Perhitungan jarak antaratom.**
3. **Perhitungan sudut ikatan.**
4. **Pembuatan tabel geometri.**
5. **Plot struktur sederhana 3D.**
6. **Perbandingan geometri awal dan akhir.**

Keenam komponen tersebut harus dipahami sebagai satu alur. Pembacaan file XYZ menyediakan data mentah. Perhitungan jarak dan sudut mengubah data mentah menjadi parameter kimia. Tabel geometri menyusun parameter tersebut secara sistematis. Plot 3D membantu visualisasi. Perbandingan geometri awal dan akhir menunjukkan perubahan akibat optimasi. Dengan demikian, Python menjembatani file output software kimia kuantum dengan laporan praktikum yang dapat dibaca dan dinilai.

1. Kedudukan Python dalam Praktikum Optimasi Geometri

Dalam Praktikum 2, Python memiliki kedudukan sebagai alat analisis, validasi, dan dokumentasi. ChemCompute atau software kimia kuantum lain menghasilkan struktur akhir, tetapi Python membantu mahasiswa memeriksa apakah struktur tersebut masuk akal secara geometri.

Python digunakan untuk menjawab pertanyaan praktis:

1. Berapa panjang ikatan H–H pada H_2 setelah optimasi?
2. Berapa panjang O–H dan sudut H–O–H pada H_2O ?
3. Apakah sudut H–N–H pada NH_3 sesuai bentuk trigonal piramida?
4. Apakah sudut H–C–H pada CH_4 mendekati tetrahedral?
5. Apakah sudut O–C–O pada CO_2 mendekati linear?
6. Seberapa besar perbedaan geometri awal dan geometri akhir?
7. Apakah perubahan struktur setelah optimasi masuk akal?
8. Apakah data geometri dapat disimpan sebagai CSV untuk laporan?

Pertanyaan-pertanyaan tersebut tidak dapat dijawab hanya dengan melihat gambar molekul. Gambar membantu, tetapi analisis ilmiah membutuhkan angka. Python menyediakan cara untuk menghitung angka tersebut secara konsisten.

Rujukan praktikum komputasi yang digunakan dalam buku ini menekankan bahwa setiap hasil perlu ditafsirkan secara kimia, bukan sekadar dilaporkan sebagai angka, dan laporan perlu memuat struktur awal, metode, basis, kriteria konvergensi, output, serta interpretasi. Jalur Python mandiri memenuhi prinsip tersebut karena mahasiswa tidak hanya mengumpulkan output optimasi, tetapi mengolahnya menjadi data yang dapat dianalisis.

2. Struktur Folder Jalur Python Mandiri

Sebelum menjalankan kode, mahasiswa harus menyiapkan struktur folder. Struktur yang disarankan adalah:

```
praktikum_02_optimasi_geometri/
├── input/
│   ├── h2_awal.xyz
│   ├── h2o_awal.xyz
│   ├── nh3_awal.xyz
│   ├── ch4_awal.xyz
│   └── co2_awal.xyz
├── output/
│   ├── h2_akhir.xyz
│   ├── h2o_akhir.xyz
│   ├── nh3_akhir.xyz
│   ├── ch4_akhir.xyz
│   └── co2_akhir.xyz
├── python/
│   └── praktikum_02_optimasi_geometri.py
├── data/
├── gambar/
└── laporan/
```

Folder `input/` berisi struktur awal sebelum optimasi. Folder `output/` berisi koordinat akhir hasil optimasi. Folder `python/` berisi kode analisis. Folder `data/` berisi tabel CSV hasil analisis. Folder `gambar/` berisi plot struktur 3D. Folder `laporan/` berisi dokumen laporan praktikum.

Struktur ini penting karena kode Python akan membaca file dari `input/` dan `output/`, lalu menyimpan hasil ke `data/` dan `gambar/`. Jika folder tidak tertib, kode sulit dijalankan ulang. Reprodusibilitas praktikum bergantung pada input lengkap, parameter komputasi, dan file output yang dapat diperiksa kembali.

3. Format File XYZ

Format XYZ adalah format sederhana untuk menyimpan koordinat atom. Struktur umum file XYZ adalah:

```
jumlah_atom
```



```

baris_komentar
simbol_atom   x   y   z
simbol_atom   x   y   z
simbol_atom   x   y   z

```

Contoh file `h2o_awal.xyz`:

```

3
H2O struktur awal
O   0.000000   0.000000   0.000000
H   0.758000   0.000000   0.504000
H  -0.758000   0.000000   0.504000

```

Baris pertama menyatakan jumlah atom. Baris kedua adalah komentar. Baris ketiga dan seterusnya berisi simbol atom dan koordinat x, y, z. Satuan koordinat biasanya Ångström pada banyak file XYZ, tetapi mahasiswa harus memastikan satuan dari sumber file. Dalam praktikum ini, koordinat XYZ dianalisis sebagai Ångström karena panjang ikatan dan sudut ikatan kimia molekul biasanya dilaporkan dalam Å dan derajat.

File XYZ bersifat sederhana, tetapi memiliki keterbatasan. File ini tidak menyimpan informasi ikatan secara eksplisit. Artinya, Python tidak otomatis tahu atom mana yang berikatan hanya dari file XYZ. Karena itu, pada kode praktikum ini, daftar ikatan dan sudut ditentukan secara manual sesuai molekul model. Pendekatan ini lebih aman untuk praktikum dasar karena molekulnya kecil dan jelas.

4. Perhitungan Jarak Antaratom

Panjang ikatan dihitung dari jarak antara dua atom dalam ruang tiga dimensi. Jika atom A memiliki koordinat:

$A = (x_A, y_A, z_A)$

dan atom B memiliki koordinat:

$B = (x_B, y_B, z_B)$

maka jarak A–B adalah:

$$d_{AB} = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2 + (z_B - z_A)^2}$$

Rumus ini adalah jarak Euclidean dalam koordinat Kartesius. Dalam konteks kimia, jarak ini ditafsirkan sebagai panjang ikatan jika atom A dan B memang berikatan.

Contoh:

- H_2 : jarak H–H.

- H₂O: jarak O–H.
- NH₃: jarak N–H.
- CH₄: jarak C–H.
- CO₂: jarak C–O.

Perhitungan jarak harus dilakukan untuk struktur awal dan struktur akhir. Dengan demikian, mahasiswa dapat melihat apakah optimasi memperpendek, memperpanjang, atau hanya sedikit mengubah ikatan.

5. Perhitungan Sudut Ikatan

Sudut ikatan dihitung dari tiga atom. Jika sudut A–B–C ingin dihitung, maka B adalah atom pusat. Dua vektor yang digunakan adalah:

$$\begin{aligned} \mathbf{BA} &= \mathbf{A} - \mathbf{B} \\ \mathbf{BC} &= \mathbf{C} - \mathbf{B} \end{aligned}$$

Sudut θ dihitung dengan rumus dot product:

$$\cos \theta = (\mathbf{BA} \cdot \mathbf{BC}) / (|\mathbf{BA}| |\mathbf{BC}|)$$

lalu:

$$\theta = \arccos[(\mathbf{BA} \cdot \mathbf{BC}) / (|\mathbf{BA}| |\mathbf{BC}|)]$$

Sudut biasanya dilaporkan dalam derajat.

Contoh sudut pada molekul model:

- H₂O: H–O–H.
- NH₃: H–N–H.
- CH₄: H–C–H.
- CO₂: O–C–O.

Untuk H₂ tidak ada sudut ikatan karena molekul hanya terdiri atas dua atom. Untuk CH₄, terdapat beberapa sudut H–C–H yang secara ideal setara. Python dapat menghitung semuanya dan menampilkan nilai rata-rata atau nilai individual. Pada praktikum dasar, menampilkan semua sudut lebih baik karena mahasiswa dapat memeriksa simetri hasil optimasi.

6. Kode Lengkap Jalur Python Mandiri

Kode Python untuk Praktikum 2 diberi nama:

praktikum_02_optimasi_geometri.py

Kode berikut memuat pembacaan koordinat XYZ, perhitungan jarak antaratom, perhitungan sudut ikatan, pembuatan tabel geometri, plot struktur sederhana 3D, dan perbandingan geometri awal serta akhir.

```
# =====
# PRAKTIKUM 2
# OPTIMASI GEOMETRI MOLEKUL SEDERHANA
#
# Nama file:
# praktikum_02_optimasi_geometri.py
#
# Fungsi kode:
# 1. Membaca koordinat XYZ awal dan akhir.
# 2. Menghitung panjang ikatan.
# 3. Menghitung sudut ikatan.
# 4. Membuat tabel geometri.
# 5. Membuat plot struktur 3D sederhana.
# 6. Membandingkan geometri awal dan akhir.
# =====

from pathlib import Path
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# =====
# 1. Definisi folder kerja
# =====

BASE_DIR = Path(__file__).resolve().parent.parent

INPUT_DIR = BASE_DIR / "input"
OUTPUT_DIR = BASE_DIR / "output"
DATA_DIR = BASE_DIR / "data"
GAMBAR_DIR = BASE_DIR / "gambar"

DATA_DIR.mkdir(exist_ok=True)
GAMBAR_DIR.mkdir(exist_ok=True)

# =====
# 2. Fungsi membaca file XYZ
# =====

def baca_xyz(path_file):
    """
    Membaca file XYZ.

    Parameter:
    path_file : str atau Path
                Lokasi file XYZ.

    Return:
```

```

simbol : list[str]
    Daftar simbol atom.
koordinat : np.ndarray
    Array koordinat atom berukuran (N, 3).
komentar : str
    Baris komentar file XYZ.
"""
path_file = Path(path_file)

if not path_file.exists():
    raise FileNotFoundError(f"File tidak ditemukan: {path_file}")

with open(path_file, "r", encoding="utf-8") as f:
    baris = [line.strip() for line in f.readlines() if line.strip()]

jumlah_atom = int(baris[0])
komentar = baris[1]

simbol = []
koordinat = []

for line in baris[2:2 + jumlah_atom]:
    bagian = line.split()
    simbol.append(bagian[0])
    koordinat.append([float(bagian[1]), float(bagian[2]),
float(bagian[3])])

koordinat = np.array(koordinat, dtype=float)

if len(simbol) != jumlah_atom:
    raise ValueError(
        f"Jumlah atom tidak sesuai pada file {path_file}. "
        f"Tertulis {jumlah_atom}, terbaca {len(simbol)}."
    )

return simbol, koordinat, komentar

# =====
# 3. Fungsi menghitung jarak dan sudut
# =====

def hitung_jarak(koordinat, i, j):
    """
    Menghitung jarak antara atom i dan atom j.

    Parameter:
    koordinat : np.ndarray
        Array koordinat atom.
    i, j : int
        Indeks atom.

    Return:
    float
        Jarak antaratom dalam Å.
    """
    return np.linalg.norm(koordinat[j] - koordinat[i])

```

```

def hitung_sudut(koordinat, i, j, k):
    """
    Menghitung sudut i-j-k dengan atom j sebagai pusat.

    Parameter:
    koordinat : np.ndarray
        Array koordinat atom.
    i, j, k : int
        Indeks atom pembentuk sudut.

    Return:
    float
        Sudut dalam derajat.
    """
    v1 = koordinat[i] - koordinat[j]
    v2 = koordinat[k] - koordinat[j]

    norm_v1 = np.linalg.norm(v1)
    norm_v2 = np.linalg.norm(v2)

    if norm_v1 == 0 or norm_v2 == 0:
        raise ValueError("Ditemukan dua atom pada koordinat yang sama.")

    cos_theta = np.dot(v1, v2) / (norm_v1 * norm_v2)
    cos_theta = np.clip(cos_theta, -1.0, 1.0)

    theta = np.degrees(np.arccos(cos_theta))
    return theta

# =====
# 4. Definisi molekul, ikatan, dan sudut
# =====

MOLEKUL = {
    "h2": {
        "nama": "H2",
        "awal": INPUT_DIR / "h2_awal.xyz",
        "akhir": OUTPUT_DIR / "h2_akhir.xyz",
        "ikatan": [
            ("H-H", 0, 1),
        ],
        "sudut": []
    },
    "h2o": {
        "nama": "H2O",
        "awal": INPUT_DIR / "h2o_awal.xyz",
        "akhir": OUTPUT_DIR / "h2o_akhir.xyz",
        "ikatan": [
            ("O-H1", 0, 1),
            ("O-H2", 0, 2),
        ],
        "sudut": [
            ("H-O-H", 1, 0, 2),
        ]
    }
}

```

```

    ],
    },
    "nh3": {
        "nama": "NH3",
        "awal": INPUT_DIR / "nh3_awal.xyz",
        "akhir": OUTPUT_DIR / "nh3_akhir.xyz",
        "ikatan": [
            ("N-H1", 0, 1),
            ("N-H2", 0, 2),
            ("N-H3", 0, 3),
        ],
        "sudut": [
            ("H1-N-H2", 1, 0, 2),
            ("H1-N-H3", 1, 0, 3),
            ("H2-N-H3", 2, 0, 3),
        ]
    },
    "ch4": {
        "nama": "CH4",
        "awal": INPUT_DIR / "ch4_awal.xyz",
        "akhir": OUTPUT_DIR / "ch4_akhir.xyz",
        "ikatan": [
            ("C-H1", 0, 1),
            ("C-H2", 0, 2),
            ("C-H3", 0, 3),
            ("C-H4", 0, 4),
        ],
        "sudut": [
            ("H1-C-H2", 1, 0, 2),
            ("H1-C-H3", 1, 0, 3),
            ("H1-C-H4", 1, 0, 4),
            ("H2-C-H3", 2, 0, 3),
            ("H2-C-H4", 2, 0, 4),
            ("H3-C-H4", 3, 0, 4),
        ]
    },
    "co2": {
        "nama": "CO2",
        "awal": INPUT_DIR / "co2_awal.xyz",
        "akhir": OUTPUT_DIR / "co2_akhir.xyz",
        "ikatan": [
            ("C-O1", 1, 0),
            ("C-O2", 1, 2),
        ],
        "sudut": [
            ("O-C-O", 0, 1, 2),
        ]
    }
}

# =====
# 5. Fungsi analisis geometri satu molekul
# =====

```

```
def analisis_geometri_molekul(kode_molekul, data_molekul):
```

```

"""
Menganalisis geometri awal dan akhir satu molekul.

Return:
tabel_ikatan : pd.DataFrame
tabel_sudut : pd.DataFrame
simbol_awal, koordinat_awal, simbol_akhir, koordinat_akhir
"""
simbol_awal, koordinat_awal, _ = baca_xyz(data_molekul["awal"])
simbol_akhir, koordinat_akhir, _ = baca_xyz(data_molekul["akhir"])

if simbol_awal != simbol_akhir:
    print(f"Peringatan: urutan atom awal dan akhir berbeda pada
{kode_molekul}.")

hasil_ikatan = []
for nama_ikatan, i, j in data_molekul["ikatan"]:
    jarak_awal = hitung_jarak(koordinat_awal, i, j)
    jarak_akhir = hitung_jarak(koordinat_akhir, i, j)
    hasil_ikatan.append({
        "molekul": data_molekul["nama"],
        "parameter": nama_ikatan,
        "jenis": "panjang ikatan",
        "nilai_awal_A": jarak_awal,
        "nilai_akhir_A": jarak_akhir,
        "perubahan_A": jarak_akhir - jarak_awal
    })

hasil_sudut = []
for nama_sudut, i, j, k in data_molekul["sudut"]:
    sudut_awal = hitung_sudut(koordinat_awal, i, j, k)
    sudut_akhir = hitung_sudut(koordinat_akhir, i, j, k)
    hasil_sudut.append({
        "molekul": data_molekul["nama"],
        "parameter": nama_sudut,
        "jenis": "sudut ikatan",
        "nilai_awal_derajat": sudut_awal,
        "nilai_akhir_derajat": sudut_akhir,
        "perubahan_derajat": sudut_akhir - sudut_awal
    })

tabel_ikatan = pd.DataFrame(hasil_ikatan)
tabel_sudut = pd.DataFrame(hasil_sudut)

return tabel_ikatan, tabel_sudut, simbol_awal, koordinat_awal,
simbol_akhir, koordinat_akhir

# =====
# 6. Fungsi plot struktur sederhana 3D
# =====

def plot_struktur_3d(simbol, koordinat, ikatan, judul, path_simpan):
    """
    Membuat plot struktur molekul 3D sederhana.

    Parameter:

```

```

simbol : list[str]
    Simbol atom.
koordinat : np.ndarray
    Koordinat atom.
ikatan : list[tuple]
    Daftar ikatan dalam format (nama, i, j).
judul : str
    Judul grafik.
path_simpan : Path
    Lokasi penyimpanan gambar.
"""
fig = plt.figure(figsize=(7, 6))
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")

x = koordinat[:, 0]
y = koordinat[:, 1]
z = koordinat[:, 2]

ax.scatter(x, y, z, s=80)

for idx, label in enumerate(simbol):
    ax.text(x[idx], y[idx], z[idx], f" {label}{idx+1}", fontsize=10)

for _, i, j in ikatan:
    ax.plot(
        [koordinat[i, 0], koordinat[j, 0]],
        [koordinat[i, 1], koordinat[j, 1]],
        [koordinat[i, 2], koordinat[j, 2]]
    )

ax.set_title(judul)
ax.set_xlabel("x (Å)")
ax.set_ylabel("y (Å)")
ax.set_zlabel("z (Å)")

plt.tight_layout()
plt.savefig(path_simpan, dpi=300, bbox_inches="tight")
plt.close()

# =====
# 7. Menjalankan analisis seluruh molekul
# =====

semua_tabel_ikatan = []
semua_tabel_sudut = []

for kode_molekul, data_molekul in MOLEKUL.items():
    print(f"\nMenganalisis {data_molekul['nama']}...")

    (
        tabel_ikatan,
        tabel_sudut,
        simbol_awal,
        koordinat_awal,
        simbol_akhir,
        koordinat_akhir
    )

```



```

) = analisis_geometri_molekul(kode_molekul, data_molekul)

semua_tabel_ikatan.append(tabel_ikatan)
semua_tabel_sudut.append(tabel_sudut)

# Simpan plot struktur awal dan akhir
plot_struktur_3d(
    simbol_awal,
    koordinat_awal,
    data_molekul["ikatan"],
    f"Struktur Awal {data_molekul['nama']}",
    GAMBAR_DIR / f"{kode_molekul}_struktur_awal.png"
)

plot_struktur_3d(
    simbol_akhir,
    koordinat_akhir,
    data_molekul["ikatan"],
    f"Struktur Akhir {data_molekul['nama']}",
    GAMBAR_DIR / f"{kode_molekul}_struktur_akhir.png"
)

# =====
# 8. Menggabungkan dan menyimpan tabel
# =====

tabel_ikatan_final = pd.concat(semua_tabel_ikatan, ignore_index=True)
tabel_sudut_final = pd.concat(semua_tabel_sudut, ignore_index=True)

tabel_ikatan_final.to_csv(
    DATA_DIR / "tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv",
    index=False
)

tabel_sudut_final.to_csv(
    DATA_DIR / "tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv",
    index=False
)

print("\nTabel panjang ikatan:")
print(tabel_ikatan_final)

print("\nTabel sudut ikatan:")
print(tabel_sudut_final)

# =====
# 9. Membuat tabel ringkasan geometri
# =====

ringkasan = []

for _, row in tabel_ikatan_final.iterrows():
    ringkasan.append({
        "molekul": row["molekul"],
        "parameter": row["parameter"],

```

```

        "jenis": row["jenis"],
        "nilai_awal": row["nilai_awal_A"],
        "nilai_akhir": row["nilai_akhir_A"],
        "perubahan": row["perubahan_A"],
        "satuan": "Å"
    })

for _, row in tabel_sudut_final.iterrows():
    ringkasan.append({
        "molekul": row["molekul"],
        "parameter": row["parameter"],
        "jenis": row["jenis"],
        "nilai_awal": row["nilai_awal_derajat"],
        "nilai_akhir": row["nilai_akhir_derajat"],
        "perubahan": row["perubahan_derajat"],
        "satuan": "derajat"
    })

tabel_ringkasan = pd.DataFrame(ringkasan)

tabel_ringkasan.to_csv(
    DATA_DIR / "ringkasan_geometri_awal_akhir.csv",
    index=False
)

print("\nRingkasan geometri awal dan akhir:")
print(tabel_ringkasan)

# =====
# 10. Kesimpulan eksekusi
# =====

print("\nAnalisis geometri selesai.")
print(f"File CSV tersimpan di folder: {DATA_DIR}")
print(f"Gambar struktur tersimpan di folder: {GAMBAR_DIR}")

```

Kode tersebut dapat dijalankan dari folder utama praktikum dengan perintah:

```
python python/praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Pada Windows PowerShell:

```
python .\python\praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Kode ini mengasumsikan bahwa file XYZ awal berada di folder `input/` dan file XYZ akhir berada di folder `output/`. Jika nama file berbeda, bagian `MOLEKUL` harus disesuaikan.

7. Penjelasan Bagian Kode

Kode di atas dibagi menjadi sepuluh bagian utama.

Bagian pertama mendefinisikan folder kerja. Kode menggunakan `pathlib` agar jalur file lebih rapi dan lebih portabel. Folder `data/` dan `gambar/` dibuat otomatis jika belum ada.

Bagian kedua berisi fungsi `baca_xyz()`. Fungsi ini membaca file XYZ, mengambil simbol atom, koordinat, dan komentar. Fungsi ini juga memeriksa apakah jumlah atom yang tertulis sesuai dengan jumlah baris koordinat yang dibaca.

Bagian ketiga berisi fungsi `hitung_jarak()` dan `hitung_sudut()`. Fungsi jarak menggunakan norma vektor. Fungsi sudut menggunakan dot product dan `arccos`. Nilai `cos_theta` dijepit dengan `np.clip()` agar kesalahan pembulatan numerik tidak menyebabkan nilai sedikit lebih besar dari 1 atau lebih kecil dari -1.

Bagian keempat mendefinisikan molekul, file awal, file akhir, daftar ikatan, dan daftar sudut. Bagian ini sangat penting karena file XYZ tidak menyimpan informasi ikatan secara eksplisit. Untuk molekul kecil, daftar ikatan dan sudut ditulis manual agar jelas.

Bagian kelima menganalisis satu molekul. Fungsi ini membaca file awal dan akhir, menghitung panjang ikatan awal dan akhir, menghitung sudut awal dan akhir, lalu menghasilkan tabel.

Bagian keenam membuat plot struktur sederhana 3D. Plot ini bukan visualisasi molekul profesional seperti Avogadro, tetapi cukup untuk laporan awal. Plot menampilkan atom, label atom, dan garis ikatan berdasarkan daftar ikatan.

Bagian ketujuh menjalankan analisis untuk semua molekul. Setiap molekul dianalisis, lalu struktur awal dan akhir diplot.

Bagian kedelapan menggabungkan tabel panjang ikatan dan tabel sudut ikatan, kemudian menyimpannya sebagai CSV.

Bagian kesembilan membuat tabel ringkasan yang menggabungkan panjang ikatan dan sudut ikatan dalam satu file.

Bagian kesepuluh menampilkan pesan bahwa analisis selesai.

8. Output yang Dihasilkan oleh Kode

Jika kode berjalan benar, output minimal yang dihasilkan adalah:

File CSV:

```
data/tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv
data/tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv
data/ringkasan_geometri_awal_akhir.csv
```

File gambar:

```
gambar/h2_struktur_awal.png
gambar/h2_struktur_akhir.png
gambar/h2o_struktur_awal.png
gambar/h2o_struktur_akhir.png
gambar/nh3_struktur_awal.png
gambar/nh3_struktur_akhir.png
gambar/ch4_struktur_awal.png
gambar/ch4_struktur_akhir.png
gambar/co2_struktur_awal.png
gambar/co2_struktur_akhir.png
```

Output tersebut menjadi bahan laporan. Tabel panjang ikatan digunakan untuk membandingkan parameter awal dan akhir. Tabel sudut ikatan digunakan untuk menganalisis bentuk molekul. Gambar struktur digunakan untuk membantu visualisasi. Ringkasan geometri digunakan untuk melihat seluruh parameter dalam satu tabel.

9. Analisis Panjang Ikatan dengan Python

Analisis panjang ikatan harus dilakukan untuk setiap molekul. Untuk H_2 , parameter utamanya adalah H–H. Untuk H_2O , dua ikatan O–H dihitung. Untuk NH_3 , tiga ikatan N–H dihitung. Untuk CH_4 , empat ikatan C–H dihitung. Untuk CO_2 , dua ikatan C–O dihitung.

Tabel panjang ikatan akhir dapat digunakan untuk melihat kesetaraan ikatan. Misalnya, pada CH_4 , semua panjang C–H seharusnya relatif setara. Pada CO_2 , dua panjang C–O juga seharusnya setara untuk molekul netral linear simetris. Jika hasil menunjukkan perbedaan besar, mahasiswa harus memeriksa struktur, file koordinat, atau status konvergensi.

Analisis panjang ikatan juga dapat menunjukkan seberapa besar optimasi mengubah struktur. Jika panjang ikatan awal berbeda jauh dari akhir, berarti struktur awal belum dekat dengan minimum. Jika perubahan kecil, struktur awal sudah cukup baik.

10. Analisis Sudut Ikatan dengan Python

Analisis sudut ikatan dilakukan untuk H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 . H_2 tidak memiliki sudut ikatan karena hanya memiliki dua atom.

Untuk H_2O , sudut H–O–H menunjukkan bentuk bengkok. Untuk NH_3 , sudut H–N–H menunjukkan bentuk trigonal piramida. Untuk CH_4 , sudut H–C–H menunjukkan tetrahedral. Untuk CO_2 , sudut O–C–O menunjukkan linearitas.

Tabel sudut ikatan akhir harus dibandingkan dengan prediksi VSEPR. VSEPR memberi kerangka kualitatif: H_2O bengkok, NH_3 trigonal piramida, CH_4 tetrahedral, dan CO_2 linear. Hasil komputasi

memberi nilai numerik yang dapat berbeda sedikit bergantung metode dan basis set. Perhitungan geometri memang bergantung pada metode dan basis; Hartree–Fock dapat memberikan panjang ikatan yang kurang akurat dibanding metode yang memasukkan korelasi elektron, meskipun tetap penting sebagai dasar konseptual.

11. Plot Struktur 3D Sederhana

Plot 3D dalam kode ini bertujuan memberi visualisasi sederhana struktur awal dan akhir. Plot ini membantu mahasiswa melihat perubahan bentuk molekul setelah optimasi. Misalnya, H₂O dapat dilihat sebagai struktur bengkok, CO₂ sebagai linear, dan CH₄ sebagai tetrahedral.

Namun, plot Python sederhana memiliki keterbatasan. Plot ini tidak menggantikan visualizer molekul profesional seperti Avogadro. Plot tidak otomatis menampilkan radius atom yang realistis, warna unsur standar, atau kualitas rendering molekul tingkat tinggi. Plot ini hanya alat bantu untuk memvisualisasikan koordinat dan hubungan ikatan berdasarkan daftar ikatan yang telah ditentukan.

Karena itu, dalam laporan, plot Python dapat digunakan sebagai gambar pendukung, sedangkan visualisasi dari Avogadro dapat digunakan sebagai pembanding jika diperlukan. Yang paling penting tetap data numerik panjang ikatan dan sudut ikatan.

12. Perbandingan Geometri Awal dan Akhir

Perbandingan geometri awal dan akhir adalah inti jalur Python mandiri. Optimasi geometri akan bermakna jika mahasiswa dapat menunjukkan apa yang berubah. Perbandingan dapat dilakukan melalui kolom:

```
nilai_awal
nilai_akhir
perubahan
```

Untuk panjang ikatan:

```
perubahan_A = nilai_akhir_A - nilai_awal_A
```

Untuk sudut ikatan:

```
perubahan_derajat = nilai_akhir_derajat - nilai_awal_derajat
```

Jika perubahan panjang ikatan negatif, berarti ikatan menjadi lebih pendek. Jika positif, berarti ikatan menjadi lebih panjang. Jika perubahan sudut positif, sudut membesar. Jika negatif, sudut mengecil.

Analisis perubahan ini harus dikaitkan dengan teori. Misalnya, jika H_2 awal dibuat terlalu panjang, optimasi dapat memperpendek H–H menuju jarak lebih stabil. Jika H_2O awal dibuat dengan sudut kurang tepat, optimasi dapat mengubah sudut menuju geometri bengkok yang lebih sesuai. Jika CO_2 awal sudah linear dan simetris, perubahan sudut mungkin kecil.

13. Pemeriksaan Kewajaran Hasil

Setelah Python menghasilkan tabel, mahasiswa harus memeriksa kewajaran hasil. Pemeriksaan ini mencakup:

1. Apakah jumlah atom sesuai?
2. Apakah panjang ikatan bernilai positif?
3. Apakah sudut berada antara 0° dan 180° ?
4. Apakah H_2O tetap bengkok?
5. Apakah NH_3 trigonal piramida?
6. Apakah CH_4 mendekati tetrahedral?
7. Apakah CO_2 mendekati linear?
8. Apakah struktur akhir berasal dari optimasi konvergen?
9. Apakah metode dan basis set dicatat?
10. Apakah file awal dan akhir tidak tertukar?

Pemeriksaan tersebut penting karena kode Python dapat menghitung angka dari koordinat apa pun, termasuk koordinat yang salah. Jika file `h2o_akhir.xyz` sebenarnya berisi struktur awal, Python tetap menghitung panjang dan sudut. Jika urutan atom berubah tetapi daftar ikatan tidak diperbarui, hasil dapat salah. Karena itu, mahasiswa harus membaca hasil secara kritis.

Hasil perhitungan harus diperiksa dari sisi konvergensi SCF, konvergensi optimasi, energi, satuan, dan konsistensi metode sebelum ditafsirkan secara kimia.

14. Contoh Interpretasi Hasil Python

Jika tabel menunjukkan bahwa panjang O–H pada H_2O awal dan akhir berbeda, mahasiswa dapat menulis:

Hasil analisis Python menunjukkan bahwa panjang ikatan O–H berubah setelah optimasi. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal belum sepenuhnya berada pada geometri kesetimbangan. Setelah optimasi, panjang ikatan O–H menjadi lebih konsisten dengan struktur H_2O yang stabil menurut metode yang digunakan.

Jika tabel menunjukkan bahwa sudut O–C–O pada CO₂ mendekati 180°, mahasiswa dapat menulis:

Sudut O–C–O hasil optimasi mendekati 180°, sehingga struktur CO₂ tetap linear. Hasil ini sesuai dengan prediksi VSEPR bahwa atom C pada CO₂ memiliki dua daerah kerapatan elektron utama yang tersusun berlawanan arah.

Jika CH₄ menghasilkan sudut H–C–H yang relatif setara, mahasiswa dapat menulis:

Sudut H–C–H pada CH₄ menunjukkan nilai yang relatif seragam. Hal ini menunjukkan bahwa struktur akhir mempertahankan karakter tetrahedral. Keseragaman panjang C–H dan sudut H–C–H juga menunjukkan simetri molekul yang tinggi.

Interpretasi harus selalu menghubungkan angka dengan konsep.

15. Keterbatasan Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki kelebihan, tetapi juga keterbatasan.

Kelebihannya:

1. Analisis transparan.
2. Rumus jarak dan sudut terlihat jelas.
3. Output dapat disimpan sebagai CSV.
4. Analisis dapat diulang untuk banyak molekul.
5. Struktur awal dan akhir dapat dibandingkan sistematis.
6. Mahasiswa belajar membaca koordinat sebagai data ilmiah.

Keterbatasannya:

1. File XYZ tidak menyimpan informasi ikatan.
2. Daftar ikatan harus ditentukan manual.
3. Plot 3D sederhana tidak sebaik visualizer molekul khusus.
4. Jika urutan atom berubah, analisis dapat salah.
5. Kode tidak memeriksa konvergensi optimasi secara otomatis dari file output.
6. Python hanya menganalisis koordinat, bukan menentukan apakah struktur adalah minimum sejati.

Keterbatasan terakhir sangat penting. Struktur akhir yang dianalisis Python harus berasal dari optimasi yang sudah konvergen. Python tidak menggantikan pemeriksaan output. Optimasi geometri idealnya juga disertai pengecekan frekuensi untuk memastikan minimum; semua frekuensi nyata menunjukkan minimum, sedangkan frekuensi imajiner menunjukkan titik sadel atau keadaan transisi.

16. Kesalahan Umum Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari:

Kesalahan	Dampak
File XYZ awal dan akhir tertukar	Perbandingan salah
Urutan atom berubah tetapi indeks tidak disesuaikan	Panjang dan sudut salah
Satuan koordinat tidak jelas	Interpretasi panjang ikatan salah
File akhir berasal dari optimasi tidak konvergen	Geometri tidak sah
Daftar ikatan salah	Tabel panjang ikatan salah
Daftar sudut salah	Tabel sudut ikatan salah
Hanya membuat plot tanpa tabel	Analisis kurang kuantitatif
Hanya membuat tabel tanpa interpretasi	Laporan kurang ilmiah
Tidak menyimpan CSV	Data sulit diverifikasi
Tidak mencatat metode dan basis set	Hasil kehilangan konteks

Kesalahan-kesalahan ini harus dicegah dengan checklist dan pembacaan output yang teliti.

17. Checklist Jalur Python Mandiri

Sebelum laporan dibuat, mahasiswa harus memeriksa checklist berikut:

```
[ ] File praktikum_02_optimasi_geometri.py berada di folder python/.
[ ] File XYZ awal tersedia di folder input/.
[ ] File XYZ akhir tersedia di folder output/.
[ ] Optimasi geometri sudah konvergen.
[ ] Urutan atom pada file awal dan akhir sudah diperiksa.
[ ] Daftar ikatan dalam kode sesuai molekul.
[ ] Daftar sudut dalam kode sesuai molekul.
[ ] Kode dapat dijalankan tanpa error.
[ ] Tabel panjang ikatan berhasil dibuat.
[ ] Tabel sudut ikatan berhasil dibuat.
[ ] Ringkasan geometri awal dan akhir berhasil dibuat.
[ ] Plot struktur awal dan akhir berhasil dibuat.
[ ] File CSV tersimpan di folder data/.
[ ] File gambar tersimpan di folder gambar/.
[ ] Hasil dianalisis berdasarkan VSEPR dan literatur.
```

Checklist ini membantu mahasiswa memastikan bahwa jalur Python mandiri tidak berhenti pada eksekusi kode, tetapi menghasilkan data yang siap dianalisis.

18. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki implikasi pedagogis yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa koordinat molekul adalah data numerik, bukan hanya gambar. Kedua, mahasiswa belajar menerjemahkan koordinat menjadi panjang ikatan dan sudut ikatan. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa visualisasi harus didukung tabel. Keempat, mahasiswa belajar bahwa hasil optimasi harus dibandingkan dengan struktur awal. Kelima, mahasiswa belajar menyusun output yang reproduksibel.

Jalur ini juga memperkuat kemampuan berpikir komputasional. Mahasiswa tidak hanya menerima angka dari software, tetapi menghitung sendiri parameter geometrinya. Mereka melihat bagaimana rumus jarak dan sudut bekerja pada koordinat molekul. Mereka memahami bahwa geometri molekul dapat dianalisis dengan operasi vektor sederhana.

Keterampilan ini akan sangat berguna pada praktikum berikutnya. Pada Bab 6, mahasiswa akan menganalisis Hartree–Fock dan basis set. Pada Bab 7, mahasiswa akan menganalisis DFT dan HOMO-LUMO. Pada Bab 9, mahasiswa akan menganalisis frekuensi vibrasi dan spektrum IR. Semua analisis tersebut membutuhkan kemampuan membaca output, mengolah data, membuat tabel, dan menafsirkan hasil secara kimia.

19. Transisi ke Nama File Kode

Subbab 5.6 telah menjelaskan jalur Python mandiri untuk membaca koordinat XYZ, menghitung jarak antaratom, menghitung sudut ikatan, membuat tabel geometri, membuat plot struktur 3D sederhana, dan membandingkan geometri awal serta akhir. Subbab berikutnya akan menetapkan nama file kode secara khusus, yaitu `praktikum_02_optimasi_geometri.py`.

Penetapan nama file penting karena kode ini menjadi pusat analisis geometri pada Praktikum 2. Semua tabel, grafik, dan perbandingan geometri harus dapat ditelusuri kembali ke file kode tersebut. Dengan demikian, subbab 5.7 akan memperkuat standar dokumentasi dan reproduksibilitas praktikum.

5.7 Nama File Kode

Nama file kode untuk Praktikum 2 ditetapkan secara baku sebagai berikut:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Penetapan nama file ini merupakan bagian penting dari disiplin kerja kimia komputasi. Dalam praktikum berbasis Python, nama file tidak hanya berfungsi sebagai label administratif, tetapi juga sebagai identitas ilmiah dari prosedur komputasi yang dilakukan. File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` menjadi pusat analisis geometri pada Praktikum 2 karena seluruh pembacaan koordinat XYZ, perhitungan panjang ikatan, perhitungan sudut ikatan,

pembuatan tabel geometri, plot struktur 3D sederhana, dan perbandingan geometri awal-akhir harus dapat ditelusuri kembali ke file ini.

Dengan kata lain, file ini adalah **dokumen prosedural**. Ia tidak hanya menyimpan instruksi komputer, tetapi juga merekam bagaimana data geometri molekul diolah menjadi informasi kimia. Jika laporan praktikum memuat tabel panjang ikatan, tabel sudut ikatan, gambar struktur, dan ringkasan perubahan geometri, maka semua output tersebut harus berasal dari kode yang tersimpan dalam file `praktikum_02_optimasi_geometri.py`. Dengan demikian, nama file kode menjadi bagian dari reproduibilitas praktikum.

1. Makna Nama File `praktikum_02_optimasi_geometri.py`

Nama file `praktikum_02_optimasi_geometri.py` terdiri atas empat bagian utama:

Bagian Nama File	Makna
<code>praktikum</code>	Menunjukkan bahwa file ini adalah kode kegiatan praktikum
<code>02</code>	Menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 2
<code>optimasi_geometri</code>	Menunjukkan topik utama, yaitu optimasi geometri molekul
<code>.py</code>	Menunjukkan bahwa file ditulis dalam bahasa Python

Struktur nama ini dibuat agar file langsung dapat dikenali tanpa harus dibuka terlebih dahulu. Ketika dosen memeriksa folder mahasiswa, nama file tersebut langsung menunjukkan bahwa file tersebut adalah kode utama untuk Praktikum 2. Ketika mahasiswa membuka ulang folder praktikum beberapa bulan kemudian, ia juga dapat mengetahui bahwa file tersebut berkaitan dengan optimasi geometri, bukan dengan partikel dalam kotak, Hartree–Fock, DFT, IR, atau energi reaksi.

Nama file yang informatif sangat penting dalam proyek komputasi karena satu praktikum dapat menghasilkan banyak file: file input XYZ, output optimasi, koordinat akhir, tabel CSV, gambar struktur, dan laporan. Jika nama file kode tidak jelas, hubungan antara kode, data, dan output menjadi kabur.

2. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama `praktikum_02_optimasi_geometri.py` menggunakan huruf kecil dan garis bawah. Pola ini dipilih karena sesuai dengan kebiasaan penamaan modul Python yang rapi dan aman. PEP 8, pedoman gaya penulisan kode Python, menyarankan agar nama modul ditulis pendek, menggunakan huruf kecil, dan garis bawah boleh dipakai jika meningkatkan keterbacaan. ([Python Enhancement Proposals \(PEPs\)](https://www.python.org/dev/peps/pep-0008/))

Dengan dasar tersebut, bentuk:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

lebih baik daripada:

```
Praktikum 02 Optimasi Geometri.py
praktikum-02-optimasi-geometri.py
PRAKTIKUM_02_OPTIMASI_GEOMETRI.py
praktikum_02_optimasi_geometri.py
praktikum_02_optimasi_geometri final.py
```

Nama file dengan spasi dapat menyulitkan pemanggilan dari terminal. Nama file dengan huruf kapital berlebihan kurang konsisten. Nama file dengan tanda hubung – kurang ideal jika file ingin diperlakukan sebagai modul Python. Nama file dengan kata *final*, *fix*, atau *revisi* dapat menimbulkan kebingungan versi. Karena itu, nama final yang harus digunakan adalah:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Nama ini ringkas, informatif, dan aman digunakan lintas sistem operasi.

3. Kedudukan File dalam Struktur Folder Praktikum

File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` harus ditempatkan dalam folder `python/` pada struktur praktikum:

```
praktikum_02_optimasi_geometri/
├── input/
├── output/
├── python/
│   └── praktikum_02_optimasi_geometri.py
├── data/
├── gambar/
└── laporan/
```

Penempatan file dalam folder `python/` memiliki alasan metodologis. Folder `input/` berisi koordinat awal. Folder `output/` berisi output optimasi dan koordinat akhir. Folder `data/` berisi tabel hasil analisis. Folder `gambar/` berisi visualisasi struktur. Folder `laporan/` berisi dokumen laporan. Dengan demikian, folder `python/` secara khusus menjadi tempat file kode analisis.

Struktur folder ini membuat hubungan kerja menjadi jelas:

```
input/      → sumber koordinat awal
output/     → sumber koordinat akhir hasil optimasi
python/     → tempat kode analisis
data/       → tempat tabel CSV hasil analisis
gambar/     → tempat plot struktur
laporan/    → tempat interpretasi akhir
```

Jika file kode diletakkan sembarangan, misalnya di folder utama, folder `data/`, atau folder `output/`, maka struktur praktikum menjadi tidak rapi. Pada praktikum kecil, kekacauan ini mungkin belum terasa. Namun, pada praktikum berikutnya jumlah file akan bertambah, sehingga disiplin folder menjadi sangat penting.

4. File Kode sebagai Penghubung Input dan Output

File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` berfungsi sebagai penghubung antara data input dan output analisis. File ini membaca koordinat awal dari folder `input/`, membaca koordinat akhir dari folder `output/`, kemudian menghasilkan tabel dan gambar ke folder `data/` serta `gambar/`.

Alur kerjanya dapat digambarkan sebagai berikut:

```
input/h2o_awal.xyz
output/h2o_akhir.xyz
    ↓
python/praktikum_02_optimasi_geometri.py
    ↓
data/tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv
data/tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv
data/ringkasan_geometri_awal_akhir.csv
gambar/h2o_struktur_awal.png
gambar/h2o_struktur_akhir.png
```

Dengan alur ini, setiap output dapat ditelusuri kembali ke file kode. Jika tabel panjang ikatan dalam laporan perlu diperiksa, dosen dapat melihat file CSV dan kode yang menghasilkannya. Jika gambar struktur dipertanyakan, dosen dapat melihat koordinat dan fungsi plot yang digunakan. Inilah makna reproduibilitas dalam praktikum komputasi.

5. Isi Minimal File `praktikum_02_optimasi_geometri.py`

File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` harus memuat isi minimal berikut:

1. Header identitas praktikum.
2. Import pustaka Python.
3. Definisi folder kerja.
4. Fungsi pembacaan file XYZ.
5. Fungsi perhitungan jarak antaratom.
6. Fungsi perhitungan sudut ikatan.
7. Definisi molekul model.
8. Definisi daftar ikatan setiap molekul.
9. Definisi daftar sudut setiap molekul.
10. Analisis geometri awal dan akhir.
11. Pembuatan tabel panjang ikatan.

12. Pembuatan tabel sudut ikatan.
13. Pembuatan tabel ringkasan geometri.
14. Plot struktur 3D sederhana.
15. Penyimpanan output CSV.
16. Penyimpanan output gambar.

Isi minimal ini tidak boleh dihilangkan karena sesuai dengan tujuan subbab 5.6. Jika file hanya membaca koordinat tetapi tidak menghitung sudut, maka file belum lengkap. Jika file hanya membuat gambar tetapi tidak menyimpan CSV, maka file belum memenuhi standar output praktikum. Jika file hanya bekerja untuk satu molekul padahal praktikum meminta H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 , maka file perlu diperbaiki.

6. Header Identitas dalam File Kode

Bagian awal file sebaiknya memuat header identitas. Header ini membantu pembaca memahami fungsi file sebelum membaca kode detail. Contoh header yang disarankan:

```
# =====
# PRAKTIKUM 2: OPTIMASI GEOMETRI MOLEKUL SEDERHANA
# =====
#
# Nama file   : praktikum_02_optimasi_geometri.py
# Topik      : Analisis geometri awal dan akhir hasil optimasi
# Molekul    : H2, H2O, NH3, CH4, CO2
# Input     : File XYZ awal dan akhir
# Output    : Tabel CSV dan gambar struktur 3D
#
# Fungsi utama:
# 1. Membaca koordinat XYZ.
# 2. Menghitung panjang ikatan.
# 3. Menghitung sudut ikatan.
# 4. Membandingkan geometri awal dan akhir.
# 5. Membuat plot struktur sederhana 3D.
# =====
```

Header ini bukan hiasan. Header adalah bagian dari dokumentasi kode. Dalam kode ilmiah, dokumentasi membantu pembaca memahami tujuan file, input yang dibutuhkan, output yang dihasilkan, dan konteks penggunaannya.

Selain header komentar, modul Python juga dapat diberi docstring pada bagian paling atas. PEP 257 menjelaskan bahwa modul sebaiknya memiliki docstring, dan fungsi atau kelas publik juga sebaiknya memiliki docstring untuk mendokumentasikan maksud penggunaannya. ([Python Enhancement Proposals \(PEPs\)](#))

Contoh docstring modul:

```
"""
Praktikum 2: Optimasi Geometri Molekul Sederhana.
```

File ini digunakan untuk membaca koordinat XYZ awal dan akhir, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membuat tabel geometri, serta membuat plot struktur 3D sederhana.

```
"""
```

Docstring membuat file lebih mudah dipahami jika kelak dibuka dalam editor Python, Jupyter, atau sistem dokumentasi.

7. Hubungan Nama File dengan Praktikum 2

Nama `optimasi_geometri` dalam file harus dipertahankan karena mencerminkan substansi Praktikum 2. Praktikum ini bukan hanya menggambar molekul, bukan hanya membaca file XYZ, dan bukan hanya membuat plot. Praktikum ini berfokus pada analisis hasil optimasi geometri.

Optimasi geometri berarti mencari susunan atom yang lebih stabil secara energi pada tingkat teori tertentu. Hasil optimasi kemudian dianalisis melalui panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, dan konvergensi. Karena itu, nama file harus menegaskan topik tersebut.

Nama seperti:

```
praktikum_02_xyz.py
praktikum_02_molekul.py
praktikum_02_gambar.py
praktikum_02_plot.py
```

kurang tepat karena terlalu sempit. File ini memang membaca XYZ dan membuat plot, tetapi tujuan utamanya adalah analisis optimasi geometri. Nama yang benar tetap:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

8. Cara Menjalankan File Kode

Jika struktur folder sudah benar, file dapat dijalankan dari folder utama praktikum.

Pada Windows PowerShell:

```
python .\python\praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Pada Linux atau macOS:

```
python python/praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Jika menggunakan Anaconda atau environment khusus, environment harus diaktifkan terlebih dahulu, misalnya:

```
conda activate kimia-kuantum
python .\python\praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Mahasiswa sebaiknya menjalankan file dari folder utama `praktikum_02_optimasi_geometri/`, bukan dari folder lain. Hal ini penting karena kode menggunakan jalur relatif. Jika file dijalankan dari lokasi yang salah, kode dapat gagal menemukan folder `input/`, `output/`, `data/`, atau `gambar/`.

Setelah dijalankan, kode harus menghasilkan file CSV dan gambar. Jika tidak ada output, mahasiswa harus memeriksa:

1. Apakah file XYZ awal tersedia.
2. Apakah file XYZ akhir tersedia.
3. Apakah nama file sesuai dengan yang tertulis dalam kode.
4. Apakah folder `data/` dan `gambar/` dapat dibuat.
5. Apakah pustaka NumPy, pandas, dan Matplotlib sudah terpasang.
6. Apakah urutan atom dalam file awal dan akhir konsisten.

9. Hubungan Nama File dengan File Input

File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` harus membaca file input secara sistematis. File input yang disarankan adalah:

```
input/h2_awal.xyz
input/h2o_awal.xyz
input/nh3_awal.xyz
input/ch4_awal.xyz
input/co2_awal.xyz
```

Nama file input memakai pola:

```
kode_molekul_awal.xyz
```

Contoh:

Molekul	File Awal
H ₂	h2_awal.xyz
H ₂ O	h2o_awal.xyz
NH ₃	nh3_awal.xyz
CH ₄	ch4_awal.xyz
CO ₂	co2_awal.xyz

Pola ini membantu kode membaca file secara teratur. Jika mahasiswa mengganti nama file menjadi `air.xyz`, `water.xyz`, `molekul1.xyz`, atau `h2o_baru.xyz`, kode harus disesuaikan. Untuk

praktikum kelas, lebih baik seluruh mahasiswa mengikuti nama file yang sama agar pemeriksaan lebih mudah.

10. Hubungan Nama File dengan File Output Optimasi

File output optimasi dari ChemCompute/GAMESS atau software lain sebaiknya disimpan dengan nama yang konsisten:

```
output/h2_optimasi.out
output/h2o_optimasi.out
output/nh3_optimasi.out
output/ch4_optimasi.out
output/co2_optimasi.out
```

Koordinat akhir hasil optimasi disimpan sebagai:

```
output/h2_akhir.xyz
output/h2o_akhir.xyz
output/nh3_akhir.xyz
output/ch4_akhir.xyz
output/co2_akhir.xyz
```

File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` terutama membaca file `*_awal.xyz` dan `*_akhir.xyz`. Namun, file output asli seperti `h2o_optimasi.out` tetap harus disimpan karena berisi energi total, status konvergensi, metode, basis set, dan informasi penting lain.

Dengan demikian, ada dua jenis output yang tidak boleh dicampur:

Jenis File	Fungsi
<code>h2o_optimasi.out</code>	Output asli dari software komputasi
<code>h2o_akhir.xyz</code>	Koordinat akhir yang diekstrak untuk analisis Python

Keduanya penting. File `.out` membuktikan perhitungan optimasi. File `.xyz` memudahkan analisis geometri.

11. Output yang Harus Dihasilkan oleh File Kode

File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` harus menghasilkan output ke folder `data/` dan `gambar/`.

Output data minimal:

```
data/tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv
data/tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv
```


data/ringkasan_geometri_awal_akhir.csv

Output gambar minimal:

```
gambar/h2_struktur_awal.png
gambar/h2_struktur_akhir.png
gambar/h2o_struktur_awal.png
gambar/h2o_struktur_akhir.png
gambar/nh3_struktur_awal.png
gambar/nh3_struktur_akhir.png
gambar/ch4_struktur_awal.png
gambar/ch4_struktur_akhir.png
gambar/co2_struktur_awal.png
gambar/co2_struktur_akhir.png
```

Namun, rincian output akan dibahas lebih lengkap pada subbab 5.8. Pada subbab ini, yang ditekankan adalah bahwa semua output tersebut harus dapat ditelusuri ke file kode yang sama, yaitu:

```
python/praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Jika output dibuat dari file kode lain, maka laporan harus menjelaskan. Akan tetapi, untuk standar praktikum, sebaiknya hanya satu file kode utama yang digunakan agar alur kerja tidak membingungkan.

12. Penamaan File Versi Percobaan

Dalam proses belajar, mahasiswa mungkin membuat beberapa versi percobaan. Misalnya:

```
praktikum_02_uji_jarak.py
praktikum_02_plot_3d.py
praktikum_02_coba_sudut.py
```

File percobaan boleh dibuat, tetapi tidak boleh menggantikan file utama. File utama pengumpulan tetap harus bernama:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Jika ingin menyimpan file percobaan, letakkan dalam folder khusus:

```
python/draft/
├── uji_baca_xyz.py
├── uji_hitung_sudut.py
└── uji_plot_3d.py
```

Dengan demikian, folder `python/` tetap memiliki file utama yang jelas, sedangkan eksperimen kode tidak mengganggu pemeriksaan.

Hindari nama file seperti:

```
praktikum_02_final.py
praktikum_02_final_fix.py
praktikum_02_revisi.py
praktikum_02_revisi_baru.py
praktikum_02_fix_banget.py
```

Nama-nama seperti itu menunjukkan manajemen versi yang tidak tertib. Jika ada revisi, cukup perbaiki isi file utama dan catat perubahan pada komentar atau log praktikum.

13. Nama File dan Integritas Akademik

Nama file kode juga berkaitan dengan integritas akademik. Laporan yang baik harus dapat ditelusuri ke file kode yang benar. Jika laporan memuat tabel panjang ikatan dan sudut ikatan, tetapi file kode yang dikumpulkan tidak menghasilkan tabel tersebut, maka ada masalah reproduisibilitas. Jika gambar struktur dalam laporan berasal dari kode lain tetapi file tersebut tidak disertakan, maka jejak ilmiahnya tidak lengkap.

Mahasiswa harus memastikan bahwa:

1. File `praktikum_02_optimasi_geometri.py` benar-benar digunakan untuk menghasilkan output laporan.
2. File kode yang dikumpulkan adalah versi terakhir.
3. File kode dapat dijalankan ulang.
4. File input dan output yang dibaca kode tersedia.
5. Tabel CSV yang dimasukkan ke laporan berasal dari kode tersebut.
6. Gambar struktur yang dimasukkan ke laporan berasal dari kode tersebut.

Integritas akademik dalam praktikum komputasi bukan hanya soal tidak menyalin kode orang lain. Integritas juga berarti menyajikan alur kerja yang jujur, dapat diperiksa, dan tidak memutus hubungan antara kode, data, dan kesimpulan.

14. Nama File dalam Laporan Praktikum

Dalam laporan, mahasiswa harus menyebut nama file kode yang digunakan. Contoh penulisan bagian metode:

```
Analisis geometri dilakukan menggunakan file Python
`praktikum_02_optimasi_geometri.py`. File ini membaca koordinat XYZ awal dan
akhir, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membuat tabel
geometri, membuat plot struktur 3D sederhana, dan menyimpan hasil analisis dalam
format CSV serta PNG.
```

Penulisan seperti ini membuat hubungan antara laporan dan kode menjadi jelas. Dosen dapat mencocokkan file laporan dengan file kode. Jika terjadi perbedaan antara tabel dalam laporan dan CSV hasil kode, maka mahasiswa dapat diminta menjelaskan atau memperbaiki.

Laporan juga sebaiknya menyebut file output yang dihasilkan:

Output analisis disimpan dalam file `data/tabel\_panjang\_ikatan\_awal\_akhir.csv`,
 `data/tabel\_sudut\_ikatan\_awal\_akhir.csv`, dan
 `data/ringkasan\_geometri\_awal\_akhir.csv`.

Dengan cara ini, laporan menjadi lebih transparan.

15. Nama File dan Pemeriksaan Dosen

Standar nama file sangat membantu pemeriksaan dosen. Dalam satu kelas, dosen dapat menerima banyak folder praktikum. Jika setiap mahasiswa memberi nama file berbeda, pemeriksaan menjadi lambat dan rawan salah. Dengan nama file standar, dosen dapat langsung mencari:

```
python/praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Kemudian dosen dapat memeriksa apakah file tersebut:

1. Ada di folder yang benar.
2. Dapat dijalankan.
3. Membaca file XYZ.
4. Menghitung panjang ikatan.
5. Menghitung sudut ikatan.
6. Menyimpan CSV.
7. Menyimpan gambar.
8. Sesuai dengan laporan.

Nama file standar juga memungkinkan pemeriksaan semiotomatis. Misalnya, dosen dapat membuat script sederhana untuk memeriksa apakah setiap folder mahasiswa memiliki file `praktikum_02_optimasi_geometri.py`. Jika nama file berbeda-beda, pemeriksaan otomatis menjadi sulit.

16. Kesalahan Umum dalam Penamaan File

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Nama File Salah	Masalah
<code>praktikum 02 optimasi geometri.py</code>	Mengandung spasi
<code>Praktikum_02_Optimasi_Geometri.py</code>	Huruf kapital tidak konsisten

praktikum-02-optimasi-geometri.py	Tanda hubung kurang ideal untuk modul Python
praktikum_02.py	Terlalu umum
optimasi.py	Tidak menunjukkan urutan praktikum
kode.py	Tidak informatif
praktikum_02_final.py	Versi final tidak jelas
praktikum_02_fix.py	Menunjukkan manajemen versi tidak tertib
praktikum_02_optimasi_geometri.txt	Ekstensi salah
praktikum_02_optimasi_geometri.docx	Bukan file kode Python

Nama yang benar adalah:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Jika mahasiswa menggunakan notebook tambahan, nama notebook yang disarankan adalah:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.ipynb
```

Namun, untuk jalur Python mandiri, file utama tetap .py.

17. Pemeriksaan Isi File Berdasarkan Nama

Nama file yang benar belum cukup. Isi file juga harus sesuai dengan nama tersebut. Jika file bernama `praktikum_02_optimasi_geometri.py`, tetapi isinya hanya mencetak teks “Hello World”, maka file tidak memenuhi standar. Jika file hanya memplot struktur tetapi tidak menghitung panjang ikatan dan sudut, maka file juga belum lengkap.

Isi file harus mencerminkan topik optimasi geometri. Minimal, file harus memuat:

```
baca_xyz()
hitung_jarak()
hitung_sudut()
definisi molekul model
analisis geometri awal dan akhir
pembuatan tabel CSV
pembuatan plot struktur 3D
```

Dengan demikian, ada kesesuaian antara nama file dan isi file. Nama file menunjukkan topik; isi file menjalankan fungsi yang sesuai dengan topik tersebut.

18. Checklist Nama File Kode

Sebelum mengumpulkan praktikum, mahasiswa harus memeriksa checklist berikut:

- [] File kode bernama praktikum_02_optimasi_geometri.py.
- [] File berada di folder python/.
- [] Nama file menggunakan huruf kecil.
- [] Nama file menggunakan garis bawah, bukan spasi.
- [] Nama file tidak mengandung kata final, fix, revisi, atau baru.
- [] Ekstensi file adalah .py.
- [] File dapat dijalankan dari folder utama praktikum.
- [] File membaca file XYZ awal dari folder input/.
- [] File membaca file XYZ akhir dari folder output/.
- [] File menghitung panjang ikatan.
- [] File menghitung sudut ikatan.
- [] File membuat tabel CSV.
- [] File membuat plot struktur 3D.
- [] Output kode sesuai dengan tabel dan gambar dalam laporan.

Checklist ini sederhana, tetapi sangat penting untuk mencegah kesalahan administratif dan teknis.

19. Implikasi Pedagogis Penamaan File

Penamaan file yang baku memiliki implikasi pedagogis. Mahasiswa belajar bahwa komputasi ilmiah membutuhkan keteraturan. Mereka belajar bahwa kode bukan benda sekali pakai, tetapi bagian dari arsip ilmiah. Mereka belajar bahwa file harus dapat ditemukan, dijalankan ulang, dan dikaitkan dengan output. Mereka juga belajar bahwa laporan ilmiah tidak hanya berisi hasil, tetapi harus memiliki jejak prosedural.

Kebiasaan ini akan sangat berguna pada praktikum berikutnya. File pada Bab 6, Bab 7, Bab 8, Bab 9, dan Bab 10 juga akan mengikuti pola serupa. Misalnya:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
praktikum_06_spektrum_ir.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Dengan pola tersebut, seluruh buku praktikum memiliki konsistensi. Mahasiswa dapat melihat perkembangan praktikum dari nama file. Dosen dapat memeriksa tugas dengan lebih mudah. Proyek komputasi menjadi lebih tertib.

20. Transisi ke Output Kode

Subbab 5.7 menetapkan bahwa file kode utama Praktikum 2 adalah praktikum_02_optimasi_geometri.py. File ini harus ditempatkan dalam folder python/, menggunakan penamaan huruf kecil dan garis bawah, serta memuat seluruh prosedur analisis geometri. Semua output analisis harus dapat ditelusuri kembali ke file ini.

Subbab berikutnya akan membahas output kode secara rinci. Output tersebut meliputi tabel panjang ikatan, tabel sudut ikatan, gambar struktur 3D sederhana, perbandingan geometri awal dan akhir, serta file CSV hasil analisis geometri. Dengan demikian, setelah nama file ditetapkan, langkah berikutnya adalah memastikan bahwa file tersebut menghasilkan output yang benar, lengkap, dan siap digunakan dalam laporan.

5.8 Output Kode

Output kode dalam Praktikum 2 adalah seluruh hasil yang dihasilkan oleh file `praktikum_02_optimasi_geometri.py` setelah kode dijalankan terhadap koordinat awal dan koordinat akhir molekul. Output ini tidak boleh dipahami hanya sebagai file tambahan, tetapi sebagai **bukti analisis geometri** yang menunjukkan bahwa mahasiswa mampu mengubah koordinat atom menjadi data kimia yang dapat dibaca, diperiksa, dibandingkan, dan ditafsirkan.

Dalam praktikum optimasi geometri, output kode memiliki kedudukan sangat penting karena hasil visual saja tidak cukup untuk membuktikan bahwa suatu struktur molekul telah dianalisis dengan benar. Molekul dapat tampak “rapi” dalam visualizer, tetapi panjang ikatan dan sudut ikatannya belum tentu wajar. Oleh karena itu, output kode harus memuat data numerik yang dapat dijadikan dasar analisis, bukan hanya gambar. Pengukuran panjang ikatan dan sudut ikatan merupakan langkah penting untuk mengubah gambar molekul menjadi data kuantitatif; panjang ikatan dan sudut ikatan menjadi data utama untuk menilai kewajaran struktur, membandingkan molekul, dan menghubungkan struktur dengan sifat kimia.

Pada Praktikum 2, output kode wajib meliputi:

1. **Tabel panjang ikatan.**
2. **Tabel sudut ikatan.**
3. **Gambar struktur 3D sederhana.**
4. **Perbandingan geometri awal dan akhir.**
5. **File CSV hasil analisis geometri.**

Kelima output tersebut saling berhubungan. Tabel panjang ikatan menunjukkan jarak antaratom yang berikatan. Tabel sudut ikatan menunjukkan bentuk lokal molekul. Gambar struktur 3D membantu visualisasi spasial. Perbandingan geometri awal dan akhir menunjukkan efek optimasi. File CSV memastikan bahwa data dapat disimpan, diperiksa ulang, dan dipakai dalam laporan. Dengan demikian, output kode menjadi jembatan antara hasil optimasi geometri dan analisis kimia yang bermakna.

1. Kedudukan Output Kode dalam Praktikum Optimasi Geometri

Dalam praktikum kimia komputasi, output kode adalah bukti bahwa proses analisis berjalan secara sistematis. Jika pada jalur ChemCompute mahasiswa memperoleh file output optimasi, maka pada jalur Python mandiri mahasiswa mengolah koordinat dari file tersebut menjadi tabel dan gambar.

Dengan kata lain, output ChemCompute adalah hasil perhitungan struktur elektronik, sedangkan output Python adalah hasil analisis geometri.

Alur hubungan output dapat digambarkan sebagai berikut:

```
file XYZ awal
file XYZ akhir
    ↓
praktikum_02_optimasi_geometri.py
    ↓
tabel panjang ikatan
tabel sudut ikatan
gambar struktur 3D
ringkasan geometri awal-akhir
file CSV hasil analisis
```

Output kode harus dapat menjawab pertanyaan berikut:

1. Berapa panjang ikatan sebelum optimasi?
2. Berapa panjang ikatan setelah optimasi?
3. Berapa sudut ikatan sebelum optimasi?
4. Berapa sudut ikatan setelah optimasi?
5. Apakah geometri berubah setelah optimasi?
6. Apakah struktur akhir masuk akal menurut teori VSEPR?
7. Apakah hasil analisis tersimpan dalam file yang dapat dibaca ulang?
8. Apakah gambar struktur awal dan akhir tersedia?
9. Apakah laporan dapat ditelusuri kembali ke file kode?

Dengan demikian, output kode bukan sekadar produk teknis. Output kode adalah instrumen validasi, dokumentasi, dan interpretasi.

2. Output Pertama: Tabel Panjang Ikatan

Output pertama adalah **tabel panjang ikatan**. Tabel ini memuat panjang ikatan pada struktur awal dan struktur akhir. Panjang ikatan adalah jarak antara dua atom yang berikatan. Dalam koordinat Kartesius, panjang ikatan dihitung menggunakan rumus jarak Euclidean:

$$d_{AB} = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2 + (z_B - z_A)^2}$$

Tabel panjang ikatan harus disimpan dalam file:

```
data/tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv
```

Struktur kolom yang disarankan:

Kolom	Makna

molekul	Nama molekul yang dianalisis
parameter	Nama ikatan, misalnya H-H, O-H1, C-H1
jenis	Jenis parameter, yaitu panjang ikatan
nilai_awal_A	Panjang ikatan sebelum optimasi dalam Å
nilai_akhir_A	Panjang ikatan setelah optimasi dalam Å
perubahan_A	Selisih nilai akhir dan awal dalam Å

Contoh bentuk tabel:

molekul	parameter	jenis	nilai_awal_A	nilai_akhir_A	perubahan_A
H ₂	H-H	panjang ikatan	...	...	...
H ₂ O	O-H1	panjang ikatan	...	...	...
H ₂ O	O-H2	panjang ikatan	...	...	...
NH ₃	N-H1	panjang ikatan	...	...	...
CH ₄	C-H1	panjang ikatan	...	...	...
CO ₂	C-O1	panjang ikatan	...	...	...

Tabel ini harus dianalisis secara kimia. Mahasiswa tidak cukup hanya menampilkan angka. Mereka harus menjelaskan apakah panjang ikatan akhir masuk akal, apakah perubahan dari struktur awal menuju struktur akhir signifikan, dan apakah ikatan yang setara memiliki panjang yang relatif sama.

Misalnya, pada CH₄, keempat ikatan C–H seharusnya relatif setara. Jika tabel menunjukkan satu ikatan C–H jauh lebih panjang daripada yang lain, mahasiswa harus memeriksa kemungkinan kesalahan: struktur awal salah, file akhir salah, urutan atom berubah, atau optimasi belum konvergen. Pada CO₂, dua ikatan C–O seharusnya relatif setara untuk molekul netral linear. Jika keduanya berbeda besar tanpa alasan, hasil perlu diperiksa.

Panjang ikatan bukan sekadar angka geometris. Panjang ikatan dapat dikaitkan dengan jenis atom, orde ikatan, hibridisasi, muatan, resonansi, dan lingkungan molekul. Dalam kimia komputasi, panjang ikatan dapat digunakan untuk memeriksa kewajaran struktur hasil optimasi; jika panjang ikatan menjadi sangat menyimpang, struktur mungkin salah atau perhitungan belum valid.

3. Output Kedua: Tabel Sudut Ikatan

Output kedua adalah **tabel sudut ikatan**. Sudut ikatan adalah sudut yang dibentuk oleh tiga atom, dengan atom tengah sebagai pusat sudut. Jika sudut A–B–C dihitung, maka B adalah atom pusat. Rumus yang digunakan adalah:

$$\cos \theta = (\mathbf{BA} \cdot \mathbf{BC}) / (|\mathbf{BA}| |\mathbf{BC}|)$$

kemudian:

$$\theta = \arccos[(\mathbf{BA} \cdot \mathbf{BC}) / (|\mathbf{BA}| |\mathbf{BC}|)]$$

Tabel sudut ikatan harus disimpan dalam file:

data/tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv

Struktur kolom yang disarankan:

Kolom	Makna
molekul	Nama molekul
parameter	Nama sudut, misalnya H-O-H atau O-C-O
jenis	Jenis parameter, yaitu sudut ikatan
nilai_awal_derajat	Sudut sebelum optimasi
nilai_akhir_derajat	Sudut setelah optimasi
perubahan_derajat	Selisih sudut akhir dan awal

Contoh bentuk tabel:

molekul	parameter	jenis	nilai_awal_derajat	nilai_akhir_derajat	perubahan_derajat
H ₂ O	H-O-H	sudut ikatan	...	...	...
NH ₃	H1-N-H2	sudut ikatan	...	...	...
CH ₄	H1-C-H2	sudut ikatan	...	...	...
CO ₂	O-C-O	sudut ikatan	...	...	...

Tabel sudut ikatan sangat penting karena bentuk molekul lebih mudah dibaca melalui sudut daripada hanya melalui koordinat x, y, z. H₂O harus menunjukkan bentuk bengkok. NH₃ harus menunjukkan bentuk trigonal piramida. CH₄ harus menunjukkan karakter tetrahedral. CO₂ harus menunjukkan linearitas. Pengukuran sudut membantu mahasiswa menghubungkan hasil pemodelan dengan teori VSEPR dan hibridisasi.

Pada H₂, tidak ada tabel sudut karena molekul hanya memiliki dua atom. Hal ini harus dijelaskan dalam laporan agar mahasiswa tidak memaksakan sudut pada molekul diatomik.

4. Output Ketiga: Gambar Struktur 3D Sederhana

Output ketiga adalah **gambar struktur 3D sederhana**. Gambar ini dihasilkan oleh Python dari koordinat XYZ awal dan akhir. Gambar struktur 3D membantu mahasiswa melihat perubahan bentuk molekul secara visual. Namun, gambar 3D ini harus dipahami sebagai pendukung data numerik, bukan pengganti tabel panjang ikatan dan sudut ikatan.

Gambar struktur 3D disimpan dalam folder:

gambar/

Nama file gambar yang disarankan:

```

gambar/h2_struktur_awal.png
gambar/h2_struktur_akhir.png
gambar/h2o_struktur_awal.png
gambar/h2o_struktur_akhir.png
gambar/nh3_struktur_awal.png
gambar/nh3_struktur_akhir.png
gambar/ch4_struktur_awal.png
gambar/ch4_struktur_akhir.png
gambar/co2_struktur_awal.png
gambar/co2_struktur_akhir.png

```

Gambar struktur 3D harus memuat:

1. Titik atom.
2. Label atom.
3. Garis ikatan sederhana.
4. Sumbu x, y, z.
5. Judul gambar.
6. Nama molekul.
7. Perbedaan antara struktur awal dan akhir.

Gambar ini berguna untuk laporan karena membantu pembaca memahami bentuk molekul. Misalnya, pembaca dapat melihat bahwa H₂O berbentuk bengkok, NH₃ trigonal piramida, CH₄ tetrahedral, dan CO₂ linear. Namun, mahasiswa harus tetap menulis bahwa gambar Python adalah visualisasi sederhana, bukan rendering molekul profesional.

Visualisasi memiliki nilai pedagogis karena membantu mahasiswa memahami struktur tiga dimensi. Akan tetapi, analisis kimia tetap harus berbasis angka. Struktur yang tampak benar secara visual dapat saja memiliki panjang ikatan atau sudut yang keliru jika koordinat salah, urutan atom berubah, atau optimasi belum konvergen.

5. Output Keempat: Perbandingan Geometri Awal dan Akhir

Output keempat adalah **perbandingan geometri awal dan akhir**. Inilah inti dari Praktikum 2. Optimasi geometri hanya bermakna jika mahasiswa dapat menunjukkan bahwa struktur awal berubah menuju struktur akhir yang lebih wajar secara energi dan kimia.

Perbandingan ini dapat dilihat dari kolom:

```

nilai_awal
nilai_akhir
perubahan

```

Untuk panjang ikatan, perubahan dihitung sebagai:

```

perubahan_A = nilai_akhir_A - nilai_awal_A

```

Untuk sudut ikatan, perubahan dihitung sebagai:

`perubahan_derajat = nilai_akhir_derajat - nilai_awal_derajat`

Interpretasi perubahan:

Nilai Perubahan	Makna
Positif pada panjang ikatan	Ikatan menjadi lebih panjang
Negatif pada panjang ikatan	Ikatan menjadi lebih pendek
Nol atau mendekati nol	Struktur awal sudah dekat dengan akhir
Positif pada sudut	Sudut membesar
Negatif pada sudut	Sudut mengecil

Perbandingan geometri awal dan akhir menunjukkan bahwa struktur yang digambar manual belum tentu berada pada geometri energi rendah. Optimasi geometri menyesuaikan panjang ikatan dan sudut agar lebih sesuai dengan model energi yang digunakan.

Contoh analisis perbandingan:

Panjang ikatan H-H pada struktur awal berbeda dari panjang ikatan H-H pada struktur akhir. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal belum berada pada geometri kesetimbangan. Setelah optimasi, jarak H-H bergerak menuju nilai yang lebih stabil menurut metode komputasi yang digunakan.

Contoh lain:

Sudut O-C-O pada CO₂ setelah optimasi mendekati 180°, sehingga struktur akhir tetap linear. Hasil ini sesuai dengan prediksi VSEPR bahwa CO₂ memiliki dua daerah kerapatan elektron utama di sekitar atom C dan berbentuk linear.

Perbandingan awal-akhir juga penting untuk mendeteksi kesalahan. Jika struktur akhir tidak berubah sama sekali dari struktur awal, ada dua kemungkinan: struktur awal sudah sangat baik, atau file akhir sebenarnya bukan hasil optimasi. Mahasiswa harus memeriksa file output dan status konvergensi.

6. Output Kelima: File CSV Hasil Analisis Geometri

Output kelima adalah **file CSV hasil analisis geometri**. CSV menjadi format utama karena mudah dibuka dengan spreadsheet, Python, editor teks, dan software analisis data. File CSV juga menjaga agar data numerik tidak hanya tersimpan dalam gambar atau laporan, tetapi dapat diperiksa dan digunakan ulang.

File CSV wajib:

`data/tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv`

data/tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv
 data/ringkasan_geometri_awal_akhir.csv

File `tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv` memuat seluruh panjang ikatan awal dan akhir. File `tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv` memuat seluruh sudut ikatan awal dan akhir. File `ringkasan_geometri_awal_akhir.csv` menggabungkan panjang ikatan dan sudut ikatan dalam satu tabel.

Struktur file ringkasan yang disarankan:

Kolom	Makna
molekul	Nama molekul
parameter	Nama parameter geometri
jenis	Panjang ikatan atau sudut ikatan
nilai_awal	Nilai sebelum optimasi
nilai_akhir	Nilai setelah optimasi
perubahan	Selisih nilai akhir dan awal
satuan	Å atau derajat

Contoh:

molekul	parameter	jenis	nilai awal	nilai akhir	perubahan	satuan
H ₂	H-H	panjang ikatan	...	...	...	Å
H ₂ O	H-O-H	sudut ikatan	...	...	...	derajat
CO ₂	O-C-O	sudut ikatan	...	...	...	derajat

CSV sangat penting untuk reproduibilitas. Jika dosen ingin memeriksa tabel dalam laporan, dosen dapat membuka CSV. Jika mahasiswa ingin membuat grafik tambahan, CSV dapat dibaca kembali oleh Python. Jika laporan perlu direvisi, data tidak perlu dihitung ulang dari awal selama file input dan output tetap sama.

7. Output Tambahan: Ringkasan Eksekusi di Terminal

Selain file CSV dan gambar, kode sebaiknya menampilkan ringkasan eksekusi di terminal. Ringkasan ini membantu mahasiswa memastikan bahwa kode berjalan dengan benar.

Contoh output terminal:

```
Menganalisis H2...
Menganalisis H2O...
Menganalisis NH3...
Menganalisis CH4...
Menganalisis CO2...

Tabel panjang ikatan:
```

...

Tabel sudut ikatan:

...

Ringkasan geometri awal dan akhir:

...

Analisis geometri selesai.

File CSV tersimpan di folder: data

Gambar struktur tersimpan di folder: gambar

Ringkasan terminal tidak menggantikan file CSV. Ringkasan terminal hanya membantu validasi cepat. Data resmi tetap harus tersimpan dalam file CSV dan gambar PNG.

Jika terminal menampilkan error, mahasiswa harus membaca pesan error dengan cermat. Error seperti `FileNotFoundException` biasanya menunjukkan nama file atau folder salah. Error pada pembacaan angka biasanya menunjukkan format XYZ tidak sesuai. Error pada perhitungan sudut dapat terjadi jika dua atom memiliki koordinat sama sehingga panjang vektor nol.

8. Output Berdasarkan Molekul Model

Output kode harus mencakup seluruh molekul model yang telah ditetapkan pada subbab 5.4.

Molekul	Output Panjang Ikatan	Output Sudut Ikatan	Output Gambar
H ₂	H–H	Tidak ada	Struktur awal dan akhir
H ₂ O	O–H1, O–H2	H–O–H	Struktur awal dan akhir
NH ₃	N–H1, N–H2, N–H3	H–N–H	Struktur awal dan akhir
CH ₄	C–H1, C–H2, C–H3, C–H4	H–C–H	Struktur awal dan akhir
CO ₂	C–O1, C–O2	O–C–O	Struktur awal dan akhir

Tabel ini dapat digunakan sebagai standar pemeriksaan. Jika file CSV tidak memuat H₂, berarti analisis belum lengkap. Jika sudut O–C–O pada CO₂ tidak ada, berarti daftar sudut perlu diperiksa. Jika CH₄ hanya memiliki satu sudut H–C–H, analisis masih dapat digunakan sebagai contoh, tetapi lebih baik menghitung semua pasangan sudut H–C–H agar simetri dapat diperiksa.

9. Standar Kualitas Tabel Panjang Ikatan

Tabel panjang ikatan yang baik harus memenuhi standar berikut:

1. Memuat nama molekul.
2. Memuat nama parameter ikatan.
3. Memuat nilai awal dan akhir.
4. Memuat satuan Å.

5. Memuat perubahan dari awal ke akhir.
6. Memiliki angka desimal yang wajar.
7. Tidak mencampur satuan Å dan nm.
8. Tidak memuat ikatan yang tidak relevan.
9. Dapat dibuka di spreadsheet.
10. Sesuai dengan file XYZ yang dianalisis.

Kesalahan umum pada tabel panjang ikatan adalah tidak mencantumkan satuan. Misalnya, tabel hanya menulis `nilai_awal` dan `nilai_akhir`, tetapi tidak menjelaskan apakah satuannya Å, nm, atau bohr. Dalam praktikum molekul, Ångström umumnya lebih mudah dibaca. Jika koordinat dari software menggunakan bohr, mahasiswa harus melakukan konversi atau menuliskan satuannya dengan jelas.

Panjang ikatan juga tidak boleh ditafsirkan tanpa konteks. Nilai yang sedikit berbeda dari literatur tidak otomatis salah karena hasil komputasi bergantung pada metode, basis set, dan kondisi. Namun, nilai yang sangat menyimpang harus diperiksa.

10. Standar Kualitas Tabel Sudut Ikatan

Tabel sudut ikatan yang baik harus memenuhi standar berikut:

1. Memuat nama molekul.
2. Memuat nama sudut.
3. Atom pusat ditulis jelas.
4. Nilai awal dan akhir dinyatakan dalam derajat.
5. Memuat perubahan sudut.
6. Sudut berada antara 0° dan 180° .
7. Sudut relevan dengan bentuk molekul.
8. Dapat dibandingkan dengan teori VSEPR.
9. Dapat digunakan dalam laporan.
10. Tidak mencampur derajat dan radian.

Penulisan nama sudut harus jelas. Misalnya:

H-O-H
H1-N-H2
H1-C-H2
O-C-O

Nama sudut harus menunjukkan atom pusat. Pada H-O-H, O adalah atom pusat. Pada O-C-O, C adalah atom pusat. Jika atom pusat tidak jelas, interpretasi sudut dapat salah.

Sudut ikatan membantu mahasiswa menghubungkan hasil komputasi dengan teori VSEPR. Sudut H-O-H menunjukkan bentuk bengkok air. Sudut H-C-H menunjukkan tetrahedral metana. Sudut

O–C–O menunjukkan linearitas karbon dioksida. Pengukuran sudut menjadi jembatan antara data numerik dan struktur molekul.

11. Standar Kualitas Gambar Struktur 3D

Gambar struktur 3D yang baik harus memenuhi standar berikut:

1. Memiliki judul.
2. Memiliki label atom.
3. Memiliki sumbu x, y, z.
4. Menampilkan struktur awal dan akhir secara terpisah.
5. Disimpan dalam format PNG.
6. Memiliki resolusi cukup untuk laporan.
7. Tidak terlalu kecil.
8. Tidak menutupi label atom.
9. Sesuai dengan koordinat XYZ.
10. Tidak menggantikan tabel numerik.

Gambar struktur 3D harus diberi nama informatif. Nama seperti `plot1.png`, `gambar2.png`, atau `molekul.png` kurang baik karena tidak menunjukkan molekul dan tahapnya. Nama yang lebih baik:

`h2o_struktur_awal.png`
`h2o_struktur_akhir.png`

Gambar awal dan akhir perlu dipisahkan agar perubahan geometri dapat dilihat. Jika gambar awal dan akhir digabung, label harus jelas agar tidak membingungkan.

12. Validasi Output Kode

Output kode harus divalidasi sebelum digunakan dalam laporan. Validasi ini mencakup pemeriksaan teknis dan kimia.

Validasi teknis:

Pemeriksaan	Hasil yang Diharapkan
File CSV terbentuk	Ada di folder <code>data/</code>
File gambar terbentuk	Ada di folder <code>gambar/</code>
Semua molekul dianalisis	H ₂ , H ₂ O, NH ₃ , CH ₄ , CO ₂
Tidak ada error saat eksekusi	Kode selesai berjalan
Kolom CSV lengkap	Molekul, parameter, nilai awal, nilai akhir, perubahan
File awal dan akhir terbaca	Tidak ada <code>FileNotFoundError</code>

Validasi kimia:

Pemeriksaan	Hasil yang Diharapkan
Panjang ikatan positif	Tidak ada nilai negatif
Sudut berada 0° – 180°	Tidak ada sudut di luar batas
H ₂ O bengkok	H–O–H tidak 180°
NH ₃ trigonal piramida	Sudut H–N–H sesuai karakter piramida
CH ₄ tetrahedral	Sudut H–C–H relatif setara
CO ₂ linear	O–C–O mendekati 180°
Struktur akhir konvergen	Dibuktikan dari file output optimasi

Validasi kimia sangat penting karena perhitungan yang tidak konvergen belum dapat digunakan secara aman untuk kesimpulan, dan perhitungan yang konvergen pun tetap perlu diperiksa kewajaran kimianya.

13. Hubungan Output Kode dengan Status Konvergensi

Output kode Python tidak secara otomatis membuktikan bahwa optimasi telah konvergen. Python hanya membaca koordinat awal dan akhir, lalu menghitung parameter geometri. Karena itu, sebelum output Python dipakai dalam laporan, mahasiswa harus memastikan bahwa file koordinat akhir berasal dari optimasi yang konvergen.

Jika optimasi tidak konvergen, maka tabel panjang ikatan dan sudut ikatan tetap dapat dihitung, tetapi tidak boleh diklaim sebagai geometri kesetimbangan. Dalam laporan, mahasiswa harus menulis bahwa data tersebut berasal dari struktur terakhir yang belum konvergen, sehingga interpretasinya terbatas.

Perbedaan ini sangat penting:

Kondisi	Status Output Python
Optimasi konvergen	Data geometri dapat dianalisis sebagai struktur akhir
Optimasi belum konvergen	Data hanya struktur sementara
File akhir salah salin	Output Python tidak valid
Urutan atom berubah	Output Python perlu diperiksa ulang
Satuan koordinat tidak jelas	Interpretasi panjang ikatan tidak aman

Dengan demikian, output kode harus selalu dikaitkan dengan status optimasi. Tabel yang rapi tidak menjamin hasil ilmiah jika sumber koordinat tidak sah.

14. Hubungan Output Kode dengan Teori VSEPR

Output kode harus digunakan untuk membandingkan hasil optimasi dengan teori VSEPR. Perbandingan ini tidak harus menghasilkan angka identik dengan sudut ideal, tetapi harus menunjukkan kesesuaian bentuk secara kualitatif.

Molekul	Output yang Diperiksa	Prediksi VSEPR
H ₂	H–H	Diatomik
H ₂ O	H–O–H	Bengkok
NH ₃	H–N–H	Trigonal piramida
CH ₄	H–C–H	Tetrahedral
CO ₂	O–C–O	Linear

Jika output kode menunjukkan H₂O linear, maka hasil perlu diperiksa. Jika NH₃ planar sempurna tanpa alasan, perlu diperiksa. Jika CH₄ tidak menunjukkan sudut yang relatif setara, perlu diperiksa. Jika CO₂ tidak linear, perlu diperiksa.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa VSEPR adalah teori kualitatif. Nilai sudut hasil komputasi dapat berbeda dari nilai ideal karena metode, basis set, korelasi elektron, dan model perhitungan. Output kode tidak digunakan untuk “memaksa” hasil sesuai VSEPR, tetapi untuk membandingkan dan menganalisis.

15. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum

Output kode harus dimasukkan ke laporan secara tertib. Bagian laporan yang menggunakan output kode dapat disusun sebagai berikut:

Bagian Laporan	Output yang Digunakan
Hasil optimasi	Energi total dan status konvergensi dari file output
Analisis panjang ikatan	tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv
Analisis sudut ikatan	tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv
Visualisasi struktur	Gambar struktur awal dan akhir
Perbandingan awal-akhir	ringkasan_geometri_awal_akhir.csv
Pembahasan	Tabel, gambar, teori VSEPR, dan literatur

Dalam laporan, mahasiswa harus menyebut sumber output. Contoh:

Tabel panjang ikatan diperoleh dari file
 `data/tabel\_panjang\_ikatan\_awal\_akhir.csv`, yang dihasilkan oleh kode
 `praktikum\_02\_optimasi\_geometri.py`.

Contoh lain:

Gambar struktur akhir H₂O diperoleh dari file `gambar/h2o\_struktur\_akhir.png`, sedangkan koordinatnya berasal dari file `output/h2o\_akhir.xyz`.

Penulisan semacam ini membuat laporan lebih transparan. Pembaca dapat mengetahui dari mana data berasal.

16. Contoh Narasi Output untuk Laporan

Berikut contoh narasi yang dapat digunakan mahasiswa dalam laporan:

Kode ``praktikum_02_optimasi_geometri.py`` menghasilkan tiga file CSV utama, yaitu ``tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv``, ``tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv``, dan ``ringkasan_geometri_awal_akhir.csv``. File pertama memuat perbandingan panjang ikatan sebelum dan sesudah optimasi. File kedua memuat perbandingan sudut ikatan sebelum dan sesudah optimasi. File ketiga menggabungkan seluruh parameter geometri dalam satu tabel ringkasan. Selain itu, kode menghasilkan gambar struktur awal dan akhir untuk setiap molekul model.

Contoh narasi untuk analisis H₂O:

Pada H₂O, output kode menunjukkan panjang ikatan O-H dan sudut H-O-H sebelum serta sesudah optimasi. Sudut H-O-H pada struktur akhir digunakan untuk menilai apakah geometri H₂O sesuai dengan bentuk bengkok yang diprediksi oleh teori VSEPR. Perubahan antara struktur awal dan akhir menunjukkan bahwa struktur yang digambar manual perlu disesuaikan oleh proses optimasi.

Contoh narasi untuk CO₂:

Pada CO₂, output kode menunjukkan dua panjang ikatan C-O dan sudut O-C-O. Jika optimasi berhasil dan struktur akhir linear, sudut O-C-O akan mendekati 180°. Kesetaraan dua panjang C-O juga menjadi indikator kewajaran struktur CO₂ netral yang simetris.

Narasi tersebut harus disesuaikan dengan data aktual mahasiswa.

17. Kesalahan Umum pada Output Kode

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Dampak
CSV tidak tersimpan	Data sulit diperiksa ulang
Gambar ada tetapi tabel tidak ada	Analisis menjadi hanya visual
Tabel ada tetapi satuan tidak jelas	Interpretasi bisa salah
File awal dan akhir tertukar	Perbandingan geometri salah
Urutan atom berubah	Panjang dan sudut yang dihitung salah
Sudut CH ₄ hanya satu tanpa alasan	Simetri tidak dapat diperiksa

Output tidak mencakup semua molekul	Praktikum belum lengkap
File gambar dinamai tidak jelas	Sulit dimasukkan ke laporan
Tidak memeriksa konvergensi	Struktur akhir belum tentu sah
Menganggap CSV otomatis benar	Output tetap harus divalidasi

Kesalahan paling serius adalah menggunakan output dari optimasi yang tidak konvergen tanpa keterangan. Jika optimasi tidak konvergen, mahasiswa harus memperbaiki perhitungan atau menyatakan keterbatasan hasil.

18. Checklist Output Kode

Sebelum laporan disusun, mahasiswa harus memeriksa checklist berikut:

```
[ ] Kode praktikum_02_optimasi_geometri.py berhasil dijalankan.
[ ] Tidak ada pesan error saat eksekusi.
[ ] File data/tabel_panjang_ikatan_awal_akhir.csv tersedia.
[ ] File data/tabel_sudut_ikatan_awal_akhir.csv tersedia.
[ ] File data/ringkasan_geometri_awal_akhir.csv tersedia.
[ ] Gambar struktur awal semua molekul tersedia.
[ ] Gambar struktur akhir semua molekul tersedia.
[ ] H2 memiliki data panjang ikatan H-H.
[ ] H2O memiliki data O-H dan H-O-H.
[ ] NH3 memiliki data N-H dan H-N-H.
[ ] CH4 memiliki data C-H dan H-C-H.
[ ] CO2 memiliki data C-O dan O-C-O.
[ ] Semua satuan panjang ditulis Å.
[ ] Semua sudut ditulis derajat.
[ ] File akhir berasal dari optimasi konvergen.
[ ] Output sudah siap dimasukkan ke laporan.
```

Checklist ini memastikan bahwa output kode lengkap, valid, dan siap dianalisis pada subbab berikutnya.

19. Analisis Kritis terhadap Output Kode

Output kode harus dibaca secara kritis. Dalam praktikum komputasi, file CSV yang terbentuk dan gambar yang tersimpan tidak otomatis membuktikan bahwa hasil benar. Python akan menghitung jarak dan sudut dari koordinat apa pun yang diberikan. Jika koordinat salah, hasil juga salah. Jika file akhir bukan hasil optimasi, output tetap terbentuk tetapi tidak bermakna sebagai geometri teroptimasi. Jika atom dalam file awal dan akhir memiliki urutan berbeda, kode dapat menghitung ikatan yang salah.

Karena itu, mahasiswa harus menilai output dari tiga sisi:

1. **Sisi teknis:** apakah kode berjalan dan file terbentuk?
2. **Sisi numerik:** apakah nilai panjang ikatan dan sudut masuk akal?
3. **Sisi kimia:** apakah hasil sesuai teori, konvergensi, dan literatur?

Sikap kritis ini penting karena kimia komputasi bukan sekadar menjalankan software. Mahasiswa harus mampu membaca, memvalidasi, dan menafsirkan output. Hasil komputasi perlu divalidasi, dianalisis secara kritis, dan disampaikan dengan klaim yang proporsional.

20. Implikasi Pedagogis Output Kode

Output kode pada Praktikum 2 memiliki implikasi pedagogis yang kuat. Pertama, mahasiswa belajar bahwa struktur molekul dapat diubah menjadi data numerik. Kedua, mahasiswa belajar bahwa panjang ikatan dan sudut ikatan adalah parameter utama untuk memahami geometri. Ketiga, mahasiswa belajar membandingkan struktur awal dan akhir sebagai bukti proses optimasi. Keempat, mahasiswa belajar bahwa visualisasi harus disertai data. Kelima, mahasiswa belajar bahwa output harus tersimpan dalam format yang dapat diperiksa ulang.

Output kode juga melatih mahasiswa membangun kebiasaan ilmiah. Mereka tidak hanya mengandalkan tampilan molekul di layar, tetapi menyusun data dalam CSV, menyimpan gambar, mencatat nama file, dan menghubungkan output dengan laporan. Kebiasaan ini akan terus dipakai pada praktikum berikutnya, terutama ketika mahasiswa menganalisis orbital, momen dipol, spektrum IR, energi reaksi, dan sifat termodinamika.

21. Transisi ke Subbab Analisis

Subbab 5.8 telah menetapkan output kode yang harus dihasilkan dari file `praktikum_02_optimasi_geometri.py`. Output tersebut meliputi tabel panjang ikatan, tabel sudut ikatan, gambar struktur 3D sederhana, perbandingan geometri awal dan akhir, serta file CSV hasil analisis geometri.

Namun, output belum cukup. Tabel dan gambar baru menjadi bermakna jika dianalisis. Oleh karena itu, subbab 5.9 akan membahas cara menafsirkan output tersebut. Mahasiswa akan membandingkan hasil optimasi dengan teori VSEPR dan data literatur, memeriksa kewajaran panjang ikatan dan sudut ikatan, serta menjelaskan hubungan antara energi minimum dan geometri stabil.

5.9 Analisis

Analisis dalam Praktikum 2 adalah proses menafsirkan hasil optimasi geometri berdasarkan **teori VSEPR**, **data literatur**, **status konvergensi**, **energi total**, serta **parameter geometri** berupa panjang ikatan dan sudut ikatan. Analisis tidak boleh berhenti pada pernyataan bahwa “optimasi berhasil” atau “struktur sudah berubah”. Mahasiswa harus menjelaskan **mengapa struktur**

berubah, apakah perubahan itu masuk akal, apakah struktur akhir sesuai teori, apakah hasil sebanding dengan data rujukan, dan apa keterbatasan metode komputasi yang digunakan.

Dalam praktikum optimasi geometri, analisis berfungsi mengubah output menjadi argumentasi kimia. File CSV, gambar struktur, panjang ikatan, sudut ikatan, dan energi total hanyalah data awal. Data tersebut baru bernilai ilmiah jika dibaca secara kritis. Struktur molekul tidak boleh dipahami hanya sebagai gambar, sebab struktur yang digambar manual belum tentu stabil. Optimasi geometri mengubah koordinat atom untuk mencari struktur yang lebih rendah energinya menurut metode tertentu, dan mahasiswa perlu memeriksa apakah perubahan tersebut wajar secara kimia.

Dalam subbab ini, analisis difokuskan pada tiga kegiatan utama:

1. **Membandingkan geometri awal dan akhir.**
2. **Membandingkan geometri akhir dengan teori VSEPR.**
3. **Membandingkan geometri akhir dengan data literatur secara proporsional.**

Ketiga kegiatan tersebut harus dilakukan secara terpadu. Geometri awal dan akhir menunjukkan efek optimasi. VSEPR memberi acuan bentuk kualitatif. Data literatur memberi pembandingan kuantitatif. Jika ketiganya dibaca bersama, mahasiswa dapat menilai apakah hasil optimasi layak diterima, perlu diperbaiki, atau harus dianalisis dengan catatan keterbatasan.

1. Pengertian Analisis Hasil Optimasi Geometri

Analisis hasil optimasi geometri adalah kegiatan memeriksa, membandingkan, dan menafsirkan struktur molekul hasil optimasi berdasarkan parameter kimia yang relevan. Parameter utama yang dianalisis dalam Praktikum 2 adalah:

1. **Panjang ikatan.**
2. **Sudut ikatan.**
3. **Energi total.**
4. **Status konvergensi.**
5. **Kesesuaian dengan teori VSEPR.**
6. **Kesesuaian dengan data literatur.**

Panjang ikatan menunjukkan jarak antara dua atom yang berikatan. Sudut ikatan menunjukkan bentuk lokal di sekitar atom pusat. Energi total menunjukkan nilai energi struktur pada tingkat teori tertentu. Status konvergensi menunjukkan apakah proses optimasi telah memenuhi kriteria numerik. Teori VSEPR memberi prediksi bentuk molekul berdasarkan tolakan pasangan elektron. Data literatur memberikan acuan pembandingan dari eksperimen atau perhitungan tingkat tinggi.

Panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut dihedral merupakan parameter utama untuk mendeskripsikan struktur molekul secara kuantitatif. Parameter tersebut membantu mengubah

struktur tiga dimensi menjadi data yang dapat dianalisis secara kimia. Dalam Praktikum 2, sudut dihedral belum menjadi fokus utama karena molekul model yang digunakan sangat sederhana. Fokus utama adalah panjang ikatan dan sudut ikatan.

Analisis yang baik harus menjawab pertanyaan berikut:

Apakah struktur akhir hasil optimasi masuk akal secara kimia?
 Apakah panjang ikatan akhir berada pada kisaran yang wajar?
 Apakah sudut ikatan akhir sesuai dengan bentuk molekul yang diprediksi VSEPR?
 Apakah energi total menurun dari struktur awal menuju struktur akhir?
 Apakah optimasi telah mencapai konvergensi?
 Apakah hasil berbeda dari literatur? Jika berbeda, apa kemungkinan penyebabnya?

Pertanyaan-pertanyaan tersebut membuat analisis bersifat argumentatif, bukan deskriptif semata.

2. Langkah Pertama: Memeriksa Status Konvergensi

Sebelum membahas panjang ikatan dan sudut ikatan, mahasiswa harus memeriksa status konvergensi. Ini adalah langkah paling penting. Struktur akhir hanya dapat dianalisis sebagai geometri teroptimasi jika optimasi telah memenuhi kriteria konvergensi.

Optimasi geometri biasanya bergerak dari struktur awal menuju struktur dengan energi lebih rendah. Pada setiap langkah, software menghitung energi dan gradien. Ketika perubahan energi, gradien, dan perpindahan atom sudah cukup kecil, optimasi dianggap konvergen. Dalam penjelasan kimia kuantum, optimasi geometri menggunakan energi dan gradien pada geometri awal, kemudian memperbarui koordinat inti sampai gradien mendekati nol dan struktur mendekati minimum.

Dalam laporan, mahasiswa harus menulis status konvergensi secara eksplisit. Contoh:

Optimasi geometri H_2O mencapai konvergensi. Oleh karena itu, koordinat akhir digunakan untuk menghitung panjang ikatan O-H dan sudut H-O-H.

Jika optimasi tidak konvergen, mahasiswa harus menulis:

Optimasi geometri NH_3 belum mencapai konvergensi. Oleh karena itu, koordinat terakhir belum dapat dianggap sebagai geometri kesetimbangan. Nilai panjang ikatan dan sudut ikatan yang dihitung hanya digunakan sebagai data sementara.

Mahasiswa tidak boleh menyembunyikan kegagalan konvergensi. Optimasi yang tidak konvergen bukan sekadar masalah teknis kecil, tetapi memengaruhi validitas seluruh analisis geometri.

3. Langkah Kedua: Membandingkan Energi Awal dan Akhir

Setelah konvergensi diperiksa, mahasiswa perlu membandingkan energi awal dan energi akhir jika data tersedia dari output. Dalam optimasi geometri, energi umumnya menurun dari struktur awal menuju struktur akhir. Penurunan energi menunjukkan bahwa struktur awal bergerak menuju struktur yang lebih stabil menurut metode komputasi yang digunakan.

Namun, mahasiswa harus berhati-hati. Energi total absolut tidak boleh dibandingkan sembarangan antar molekul berbeda. Energi total H₂O tidak dapat dibandingkan langsung dengan energi total CH₄ untuk menyimpulkan molekul mana yang “lebih stabil”, karena komposisi atom, jumlah elektron, dan jumlah inti berbeda. Yang lebih tepat dalam Praktikum 2 adalah membandingkan energi molekul yang sama sebelum dan sesudah optimasi.

Contoh analisis energi:

Energi total H₂O menurun setelah optimasi. Hal ini menunjukkan bahwa struktur awal yang dibuat secara manual belum berada pada titik energi rendah. Penurunan energi disertai perubahan panjang ikatan O–H dan sudut H–O–H, sehingga optimasi menghasilkan geometri yang lebih stabil menurut metode yang digunakan.

Energi total harus selalu ditulis bersama metode dan basis set. Contoh:

Energi total akhir H₂O pada metode HF/STO-3G adalah ... Hartree.

Pernyataan seperti itu lebih ilmiah daripada hanya menulis “energi akhir adalah ...” tanpa konteks.

4. Langkah Ketiga: Membandingkan Geometri Awal dan Akhir

Perbandingan geometri awal dan akhir adalah inti analisis praktikum. Struktur awal adalah struktur yang dibuat mahasiswa sebelum optimasi. Struktur akhir adalah struktur setelah optimasi konvergen. Perbandingan keduanya menunjukkan efek optimasi.

Parameter yang dibandingkan adalah:

Parameter	Contoh Molekul	Makna
Panjang H–H	H ₂	Jarak ikatan diatomik
Panjang O–H	H ₂ O	Jarak ikatan O dan H
Sudut H–O–H	H ₂ O	Bentuk bengkok
Panjang N–H	NH ₃	Jarak ikatan N dan H
Sudut H–N–H	NH ₃	Trigonal piramida
Panjang C–H	CH ₄	Ikatan tetrahedral
Sudut H–C–H	CH ₄	Sudut tetrahedral
Panjang C=O	CO ₂	Ikatan C dan O
Sudut O–C–O	CO ₂	Linearitas

Mahasiswa harus memperhatikan apakah perubahan geometri besar atau kecil. Jika perubahan kecil, struktur awal sudah cukup dekat dengan geometri optimum. Jika perubahan besar, struktur awal masih jauh dari minimum energi. Namun, perubahan besar tidak otomatis salah; ia dapat menunjukkan bahwa optimasi benar-benar memperbaiki struktur awal yang buruk.

Contoh analisis:

Perbandingan geometri awal dan akhir menunjukkan bahwa panjang ikatan O-H berubah setelah optimasi. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal hasil gambar manual belum sepenuhnya sesuai dengan geometri energi rendah. Setelah optimasi, panjang ikatan menjadi lebih konsisten dan sudut H-O-H tetap menunjukkan bentuk bengkok.

Panjang ikatan dan sudut ikatan juga dapat digunakan sebagai data validasi. Jika hasil optimasi memberikan parameter yang tidak masuk akal, mahasiswa perlu memeriksa struktur awal, metode, muatan, atau status konvergensi.

5. Analisis Berdasarkan Teori VSEPR

Teori VSEPR atau **Valence Shell Electron Pair Repulsion** menyatakan bahwa pasangan elektron di sekitar atom pusat cenderung menempati posisi yang meminimalkan tolakan. Teori ini memberi prediksi bentuk molekul secara kualitatif. Dalam Praktikum 2, VSEPR digunakan sebagai pembanding awal terhadap hasil optimasi.

Perbandingan VSEPR dan hasil optimasi dapat disusun sebagai berikut:

Molekul	Prediksi VSEPR	Parameter yang Diperiksa
H ₂	Diatomik	Panjang H-H
H ₂ O	Bengkok	Sudut H-O-H
NH ₃	Trigonal piramida	Sudut H-N-H
CH ₄	Tetrahedral	Sudut H-C-H
CO ₂	Linear	Sudut O-C-O

VSEPR tidak memberikan seluruh detail kuantitatif, tetapi sangat berguna untuk menilai bentuk. Jika hasil optimasi H₂O menjadi linear, maka hasil tersebut tidak sesuai dengan VSEPR dan harus diperiksa. Jika NH₃ menjadi planar sempurna, hasil tersebut juga perlu dipertanyakan. Jika CH₄ tidak mendekati tetrahedral, kemungkinan ada masalah pada struktur awal, input, metode, atau konvergensi. Jika CO₂ tidak mendekati linear, mahasiswa harus memeriksa apakah koordinat akhir benar.

Namun, mahasiswa juga harus memahami batas VSEPR. VSEPR adalah teori kualitatif. Nilai sudut aktual atau hasil komputasi tidak selalu sama persis dengan nilai ideal. Sudut pada molekul dengan pasangan elektron bebas dapat lebih kecil daripada sudut ideal karena repulsi pasangan elektron bebas, dan nilai ideal harus dipahami sebagai acuan, bukan angka mutlak.

Dengan demikian, analisis VSEPR harus bersifat proporsional. Hasil komputasi tidak harus sama persis dengan sudut ideal, tetapi bentuk molekul secara kualitatif harus masuk akal.

6. Analisis H₂

H₂ adalah molekul paling sederhana dalam Praktikum 2. Analisis H₂ berfokus pada satu parameter utama:

panjang ikatan H-H

H₂ tidak memiliki sudut ikatan karena hanya terdiri atas dua atom. Dalam analisis, mahasiswa membandingkan panjang H-H awal dan akhir. Jika struktur awal dibuat terlalu panjang, optimasi cenderung memperpendek jarak. Jika struktur awal dibuat terlalu pendek, optimasi dapat memperpanjang jarak. Tujuannya adalah mencari jarak yang lebih stabil menurut metode yang digunakan.

Contoh analisis:

Pada H₂, parameter utama yang dianalisis adalah panjang ikatan H-H. Hasil optimasi menunjukkan perubahan panjang H-H dari struktur awal menuju struktur akhir. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal yang dibuat manual belum tentu berada pada jarak energi minimum. Setelah optimasi, jarak H-H menjadi parameter utama untuk menilai kewajaran geometri akhir.

H₂ mengajarkan bahwa ikatan kimia memiliki panjang optimum. Jika atom terlalu dekat, tolakan inti meningkat. Jika atom terlalu jauh, interaksi ikatan melemah. Geometri stabil berada pada jarak yang menyeimbangkan gaya tarik dan tolak.

Dalam laporan, mahasiswa dapat membandingkan panjang H-H akhir dengan data literatur. Untuk praktikum dasar, perbedaan kecil masih dapat diterima, terutama jika metode yang digunakan sederhana seperti HF/STO-3G. Jika perbedaannya besar, mahasiswa harus memeriksa konvergensi, satuan, dan file koordinat.

7. Analisis H₂O

H₂O dianalisis melalui dua parameter utama:

panjang ikatan O-H
sudut H-O-H

Menurut teori VSEPR, H₂O berbentuk bengkok karena atom O memiliki dua pasangan elektron ikatan dan dua pasangan elektron bebas. Pasangan elektron bebas memengaruhi sudut ikatan

sehingga molekul tidak linear. Oleh karena itu, hasil optimasi yang baik harus menunjukkan bentuk bengkok, bukan linear.

Contoh analisis:

Pada H_2O , hasil optimasi dianalisis melalui panjang ikatan O-H dan sudut H-O-H. Struktur akhir tetap menunjukkan bentuk bengkok, sesuai prediksi VSEPR untuk molekul AX_2E_2 . Jika sudut H-O-H tidak mendekati karakter bengkok atau mendekati 180° , maka hasil perlu diperiksa ulang.

H_2O juga menjadi contoh penting untuk menghubungkan geometri dengan sifat molekul. Karena bentuknya bengkok, momen dipol dua ikatan O-H tidak saling meniadakan. Akibatnya, H_2O memiliki momen dipol permanen. Meskipun momen dipol belum menjadi fokus Praktikum 2, mahasiswa dapat menyebut secara singkat bahwa bentuk bengkok memiliki implikasi terhadap polaritas molekul.

Analisis H_2O harus memperhatikan kesetaraan dua ikatan O-H. Pada molekul H_2O netral, dua panjang O-H seharusnya relatif sama. Jika berbeda besar, ada kemungkinan struktur tidak simetris, optimasi belum konvergen, atau file koordinat salah.

8. Analisis NH_3

NH_3 dianalisis melalui:

panjang ikatan N-H
sudut H-N-H

Menurut VSEPR, NH_3 berbentuk trigonal piramida karena atom N memiliki tiga pasangan elektron ikatan dan satu pasangan elektron bebas. Bentuk ini berbeda dari trigonal planar. Jika NH_3 hasil optimasi menjadi planar sempurna, mahasiswa harus berhati-hati.

Dalam literatur kimia kuantum, terdapat contoh bahwa optimasi NH_3 yang dimulai dari geometri planar dapat konvergen ke struktur planar yang sebenarnya merupakan titik pelana, bukan minimum sejati. Untuk memastikan titik stasioner benar-benar minimum, perlu dilakukan perhitungan frekuensi; semua frekuensi nyata menunjukkan minimum, sedangkan satu frekuensi imajiner menunjukkan titik pelana orde pertama.

Contoh analisis NH_3 :

Pada NH_3 , hasil optimasi harus dianalisis dengan memperhatikan bentuk trigonal piramida. Sudut H-N-H dan posisi atom N terhadap bidang tiga atom H menunjukkan apakah struktur akhir sesuai dengan prediksi VSEPR. Jika hasil optimasi menunjukkan NH_3 planar, struktur tersebut tidak boleh langsung dianggap sebagai minimum, karena dapat merupakan titik pelana. Validasi lebih lanjut dengan perhitungan frekuensi diperlukan jika tersedia.

Analisis NH_3 mengajarkan bahwa konvergensi numerik tidak selalu cukup. Struktur dapat mencapai titik stasioner, tetapi titik tersebut belum tentu minimum. Karena itu, mahasiswa perlu memahami perbedaan antara geometri konvergen dan geometri minimum sejati.

9. Analisis CH_4

CH_4 dianalisis melalui:

panjang ikatan C-H
sudut H-C-H

Menurut VSEPR, CH_4 berbentuk tetrahedral karena atom C memiliki empat pasangan elektron ikatan dan tidak memiliki pasangan elektron bebas. Sudut tetrahedral ideal sekitar $109,5^\circ$. Dalam hasil optimasi, nilai sudut H-C-H seharusnya mendekati karakter tetrahedral. Semua ikatan C-H juga seharusnya relatif setara.

Contoh analisis:

Pada CH_4 , panjang ikatan C-H hasil optimasi relatif setara, dan sudut H-C-H menunjukkan karakter tetrahedral. Hasil ini sesuai dengan prediksi VSEPR untuk molekul AX_4 . Kesetaraan panjang ikatan dan sudut menunjukkan simetri molekul yang tinggi.

Jika hasil menunjukkan panjang C-H sangat berbeda satu sama lain, mahasiswa harus memeriksa file XYZ. Kemungkinan ada kesalahan urutan atom, struktur awal tidak simetris, optimasi belum konvergen, atau atom H salah dianalisis.

CH_4 sangat penting untuk membedakan antara gambar dua dimensi dan struktur tiga dimensi. Dalam gambar datar, CH_4 sering tampak seperti salib atau bentuk sederhana. Dalam geometri sebenarnya, empat atom H mengarah ke sudut tetrahedral. Dengan demikian, analisis CH_4 membantu mahasiswa memahami bahwa struktur molekul harus dibaca dalam ruang tiga dimensi.

10. Analisis CO_2

CO_2 dianalisis melalui:

panjang ikatan C=O
sudut O-C-O

Menurut VSEPR, CO_2 berbentuk linear karena atom C memiliki dua daerah kerapatan elektron utama. Sudut O-C-O seharusnya mendekati 180° . Dua panjang ikatan C=O juga seharusnya relatif setara pada molekul netral simetris.

Contoh analisis:

Pada CO_2 , sudut O-C-O hasil optimasi mendekati linear. Hal ini sesuai dengan prediksi VSEPR bahwa dua daerah kerapatan elektron di sekitar atom C tersusun berlawanan arah. Dua panjang ikatan C-O yang relatif setara menunjukkan simetri molekul CO_2 .

CO_2 juga memberi kesempatan untuk menghubungkan geometri dengan polaritas. Ikatan C=O bersifat polar, tetapi geometri linear menyebabkan momen dipol dua ikatan saling meniadakan. Oleh karena itu, CO_2 secara keseluruhan tidak memiliki momen dipol permanen. Pembahasan ini tidak perlu diperpanjang dalam Praktikum 2, tetapi dapat disebut sebagai implikasi struktur terhadap sifat molekul.

Jika hasil optimasi menunjukkan CO_2 bengkok tanpa alasan, mahasiswa harus memeriksa apakah struktur awal salah, optimasi belum konvergen, atau koordinat akhir salah disalin.

11. Perbandingan dengan Data Literatur

Perbandingan dengan data literatur adalah tahap penting dalam analisis. Data literatur dapat berasal dari buku teks kimia fisik, kimia kuantum, kimia struktur, basis data kimia komputasi, atau data eksperimen gas fase. Salah satu sumber pembandingan yang dikenal dalam kimia komputasi adalah basis data NIST CCCBDB, yang memuat hasil perhitungan ab initio, DFT, semiempiris, serta data eksperimen gas fase untuk banyak spesies molekul.

Dalam laporan, mahasiswa dapat menyajikan tabel pembandingan seperti berikut:

Molekul	Parameter	Hasil Optimasi	Data Literatur	Selisih	Interpretasi
H_2	H-H	...	...	...	Dibandingkan dengan panjang ikatan rujukan
H_2O	H-O-H	...	...	...	Dibandingkan dengan bentuk bengkok
NH_3	H-N-H	...	...	...	Dibandingkan dengan trigonal piramida
CH_4	H-C-H	...	...	...	Dibandingkan dengan tetrahedral
CO_2	O-C-O	...	...	...	Dibandingkan dengan linearitas

Mahasiswa harus menulis sumber data literatur yang digunakan. Jika data berasal dari buku atau basis data, cantumkan nama sumbernya. Jika data berasal dari hasil komputasi lain, sebutkan metode dan basis setnya. Jangan mencampur data eksperimen dan data komputasi tanpa penjelasan.

Perbedaan antara hasil optimasi dan literatur dapat disebabkan oleh:

1. Metode komputasi yang digunakan.
2. Basis set yang dipilih.
3. Tidak dimasukkannya korelasi elektron secara memadai.
4. Efek vibrasi.
5. Fase data literatur, misalnya gas, cair, atau padat.
6. Ketelitian eksperimen atau teori pembanding.
7. Satuan yang tidak sama.
8. Kesalahan input atau output.

Mahasiswa tidak boleh langsung menyatakan hasil “salah” hanya karena tidak identik dengan literatur. Yang perlu dilakukan adalah menjelaskan penyebab perbedaan secara proporsional.

12. Perbedaan Hasil Akibat Metode Komputasi

Salah satu bagian penting dari analisis adalah memahami bahwa metode komputasi berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda. Hartree–Fock, DFT, semiempiris, mekanika molekular, DFTB, dan xTB memiliki asumsi, parameter, dan domain validitas berbeda.

Dalam kimia kuantum, metode *ab initio* seperti Hartree–Fock didasarkan pada prinsip dasar, tetapi tidak berarti 100% benar. Hartree–Fock menggunakan pendekatan fungsi gelombang berbasis spin-orbital satu elektron dan basis set hingga, sehingga tetap mengandung aproksimasi. DFT menggunakan pendekatan kerapatan elektron, semiempiris menggunakan parameterisasi, dan mekanika molekular memperlakukan molekul melalui fungsi gaya tanpa menyelesaikan Hamiltonian elektronik secara eksplisit.

Karena itu, mahasiswa harus menulis hasil dengan konteks:

Geometri yang diperoleh merupakan hasil optimasi pada metode dan basis set yang digunakan, bukan nilai mutlak yang bebas dari aproksimasi.

Contoh analisis:

Jika hasil HF/STO-3G memberikan panjang ikatan yang berbeda dari data literatur, perbedaan tersebut dapat berasal dari basis set yang kecil dan keterbatasan metode Hartree–Fock dalam memperhitungkan korelasi elektron. Oleh karena itu, hasil praktikum perlu ditafsirkan sebagai latihan konseptual optimasi geometri, bukan sebagai prediksi geometri presisi tinggi.

Analisis seperti ini menunjukkan kedewasaan ilmiah. Mahasiswa tidak hanya melaporkan angka, tetapi memahami batas model.

13. Analisis Kesalahan dan Ketidakpastian

Analisis tidak lengkap jika tidak membahas kemungkinan kesalahan. Dalam Praktikum 2, kesalahan dapat berasal dari beberapa tahap.

Kesalahan pada struktur awal:

1. Molekul digambar dengan bentuk salah.
2. Atom terlalu dekat.
3. Atom terlalu jauh.
4. Simetri molekul tidak wajar.
5. Konektivitas salah.

Kesalahan pada input perhitungan:

1. Muatan salah.
2. Multiplicity salah.
3. Metode salah pilih.
4. Basis set tidak sesuai.
5. Job yang dipilih bukan optimasi, tetapi single point.

Kesalahan pada output:

1. Optimasi tidak konvergen.
2. SCF tidak konvergen.
3. File output salah molekul.
4. Koordinat akhir salah disalin.
5. Urutan atom berubah.

Kesalahan pada analisis Python:

1. File awal dan akhir tertukar.
2. Indeks atom salah.
3. Satuan koordinat tidak jelas.
4. Sudut dihitung dengan atom pusat yang salah.
5. Data CSV tidak sesuai dengan file laporan.

Mahasiswa harus membahas kesalahan yang relevan, bukan semua kemungkinan. Jika hasil praktikum baik, cukup tuliskan bahwa konvergensi telah diperiksa, satuan telah dipastikan, dan nilai geometri masuk akal. Jika hasil menyimpang, jelaskan kemungkinan penyebabnya.

14. Contoh Format Analisis dalam Laporan

Bagian analisis dalam laporan dapat disusun sebagai berikut:

5. Analisis Hasil

5.1 Validasi Konvergensi

Menjelaskan apakah optimasi setiap molekul konvergen.

5.2 Analisis Panjang Ikatan

Membahas panjang H-H, O-H, N-H, C-H, dan C-O.

5.3 Analisis Sudut Ikatan

Membahas H-O-H, H-N-H, H-C-H, dan O-C-O.

5.4 Perbandingan dengan VSEPR

Membandingkan bentuk molekul hasil optimasi dengan prediksi VSEPR.

5.5 Perbandingan dengan Data Literatur

Membandingkan hasil optimasi dengan nilai rujukan dan menjelaskan selisih.

5.6 Keterbatasan Metode

Menjelaskan pengaruh metode, basis set, dan keterbatasan praktikum.

Struktur ini membantu mahasiswa menulis analisis yang runtut. Analisis tidak boleh berupa kumpulan angka tanpa narasi. Data geometri harus digunakan untuk mendukung argumen kimia. Dalam laporan praktikum, parameter geometri perlu dipilih sesuai tujuan; tabel yang terlalu panjang tanpa interpretasi dapat mengaburkan analisis, sehingga mahasiswa perlu menulis kalimat pembahasan setelah tabel.

15. Contoh Analisis Terpadu

Berikut contoh analisis terpadu yang dapat dijadikan pola penulisan. Angka harus disesuaikan dengan hasil praktikum masing-masing.

Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa struktur awal mengalami perubahan panjang ikatan dan sudut ikatan setelah proses optimasi. Perubahan ini menunjukkan bahwa struktur awal yang dibuat secara manual belum sepenuhnya berada pada geometri energi rendah. Pada H_2 , perubahan utama terlihat pada panjang ikatan H-H. Pada H_2O , parameter penting adalah panjang O-H dan sudut H-O-H. Struktur akhir H_2O tetap menunjukkan bentuk bengkok, sesuai dengan prediksi VSEPR untuk molekul AX_2E_2 .

Pada NH_3 , sudut H-N-H menunjukkan karakter trigonal piramida. Hal ini sesuai dengan teori VSEPR karena atom N memiliki tiga pasangan elektron ikatan dan satu pasangan elektron bebas. Pada CH_4 , sudut H-C-H menunjukkan karakter tetrahedral dan panjang C-H relatif setara. Pada CO_2 , sudut O-C-O mendekati 180° , menunjukkan bentuk linear yang sesuai dengan prediksi VSEPR.

Perbandingan dengan data literatur menunjukkan bahwa hasil optimasi berada pada kisaran yang wajar, meskipun tidak identik. Perbedaan tersebut dapat disebabkan oleh metode dan basis set yang digunakan. Karena praktikum ini menggunakan metode sederhana untuk tujuan pembelajaran, hasil lebih tepat ditafsirkan sebagai latihan memahami optimasi geometri, bukan sebagai prediksi struktur paling presisi.

Contoh tersebut menunjukkan hubungan antara struktur awal, struktur akhir, VSEPR, literatur, dan keterbatasan metode.

16. Analisis Kritis terhadap VSEPR dan Data Komputasi

VSEPR dan optimasi geometri memiliki fungsi berbeda. VSEPR membantu memprediksi bentuk molekul secara kualitatif. Optimasi geometri memberikan nilai koordinat, panjang ikatan, sudut ikatan, dan energi pada tingkat teori tertentu. Keduanya tidak boleh dipertentangkan secara sederhana.

Jika hasil optimasi sedikit berbeda dari nilai ideal VSEPR, bukan berarti hasil salah. Misalnya, sudut pada molekul dengan pasangan bebas dapat lebih kecil dari nilai ideal karena tolakan pasangan bebas. Jika hasil optimasi mendekati bentuk kualitatif yang benar, maka hasil dapat dianggap sesuai secara konseptual.

Namun, jika hasil menyimpang besar, mahasiswa harus kritis. Misalnya:

- H₂O menjadi linear.
- NH₃ menjadi planar tanpa validasi frekuensi.
- CH₄ menjadi datar.
- CO₂ menjadi bengkok.
- Panjang ikatan menjadi sangat tidak realistis.
- Sudut berada di luar batas 0°–180°.

Penyimpangan besar harus memicu pemeriksaan ulang, bukan langsung diterima. Kimia komputasi memerlukan sikap kritis karena software dapat menghasilkan output dari input yang salah.

17. Implikasi Analisis terhadap Pemahaman Molekul

Analisis Praktikum 2 memiliki implikasi pembelajaran yang besar. Pertama, mahasiswa memahami bahwa geometri molekul adalah hasil keseimbangan energi, bukan sekadar gambar. Kedua, mahasiswa memahami bahwa bentuk molekul dapat dianalisis secara kuantitatif melalui panjang ikatan dan sudut ikatan. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa teori VSEPR tetap berguna sebagai pembanding, tetapi hasil komputasi memberi data numerik yang lebih rinci. Keempat, mahasiswa belajar bahwa metode komputasi memiliki batas. Kelima, mahasiswa mulai memahami hubungan antara struktur dan sifat molekul.

Analisis ini juga menjadi dasar bagi praktikum berikutnya. Pada perhitungan HOMO-LUMO, struktur awal harus sudah teroptimasi. Pada perhitungan momen dipol, geometri sangat menentukan arah dan besar momen. Pada perhitungan IR, frekuensi vibrasi sangat bergantung pada geometri dan Hessian. Pada perhitungan energi reaksi, geometri reaktan, produk, dan keadaan

transisi harus valid. Dengan demikian, analisis geometri bukan bagian kecil, melainkan fondasi seluruh praktikum kimia kuantum berikutnya.

18. Checklist Analisis

Sebelum menyelesaikan laporan, mahasiswa harus memeriksa checklist berikut:

- [] Status konvergensi setiap molekul sudah diperiksa.
- [] Energi total akhir dicatat dengan metode dan basis set.
- [] Panjang ikatan awal dan akhir sudah dibandingkan.
- [] Sudut ikatan awal dan akhir sudah dibandingkan.
- [] H_2 dianalisis berdasarkan panjang H-H.
- [] H_2O dianalisis berdasarkan O-H dan H-O-H.
- [] NH_3 dianalisis berdasarkan N-H dan H-N-H.
- [] CH_4 dianalisis berdasarkan C-H dan H-C-H.
- [] CO_2 dianalisis berdasarkan C-O dan O-C-O.
- [] Hasil dibandingkan dengan teori VSEPR.
- [] Hasil dibandingkan dengan data literatur bila tersedia.
- [] Perbedaan hasil dijelaskan secara proporsional.
- [] Keterbatasan metode dan basis set disebutkan.
- [] Tidak ada klaim berlebihan bahwa hasil komputasi adalah nilai mutlak.

Checklist ini memastikan bahwa analisis tidak hanya menampilkan angka, tetapi juga menjelaskan makna kimianya.

19. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Subbab 5.9 telah membahas cara menganalisis hasil optimasi geometri. Mahasiswa telah diarahkan untuk memeriksa konvergensi, membandingkan geometri awal dan akhir, menganalisis panjang ikatan, menganalisis sudut ikatan, membandingkan hasil dengan teori VSEPR, serta membandingkan hasil dengan data literatur secara kritis.

Subbab berikutnya, 5.10, akan memuat pertanyaan diskusi. Pertanyaan tersebut akan menguji pemahaman mahasiswa terhadap konsep inti optimasi geometri: mengapa struktur awal perlu dioptimasi, apa arti konvergensi, mengapa metode berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda, dan apa hubungan energi minimum dengan geometri stabil. Dengan demikian, pertanyaan diskusi menjadi tahap refleksi setelah mahasiswa menghasilkan output dan melakukan analisis.

5.10 Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi pada Praktikum 2 berfungsi sebagai alat refleksi konseptual setelah mahasiswa menjalankan optimasi geometri, membaca output, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membandingkan geometri awal dan akhir, serta menafsirkan hasil berdasarkan teori VSEPR dan data literatur. Pertanyaan diskusi tidak boleh dipahami sebagai bagian tambahan yang

bersifat formalitas. Sebaliknya, pertanyaan diskusi adalah sarana untuk menguji apakah mahasiswa benar-benar memahami makna optimasi geometri, konvergensi, perbedaan metode komputasi, dan hubungan antara energi minimum dengan struktur molekul stabil.

Pada praktikum kimia komputasi, mahasiswa sering kali merasa tugas selesai ketika software berhasil menghasilkan file output. Pandangan seperti itu perlu dikoreksi. File output hanyalah data mentah. Tabel panjang ikatan, tabel sudut ikatan, dan gambar struktur 3D juga belum cukup jika tidak disertai penjelasan teoritis. Pertanyaan diskusi memaksa mahasiswa menjawab pertanyaan “mengapa” dan “apa maknanya”, bukan hanya “berapa hasilnya”. Dengan cara ini, praktikum optimasi geometri tidak menjadi kegiatan mekanis menekan tombol, tetapi menjadi latihan berpikir ilmiah.

Pertanyaan diskusi pada Praktikum 2 terdiri atas empat pertanyaan utama:

1. **Mengapa struktur awal perlu dioptimasi?**
2. **Apa arti konvergensi?**
3. **Mengapa metode komputasi berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda?**
4. **Apa hubungan energi minimum dengan geometri stabil?**

Keempat pertanyaan tersebut saling berkaitan. Struktur awal perlu dioptimasi karena koordinat yang digambar manual belum tentu berada pada minimum energi. Konvergensi diperlukan untuk memastikan bahwa proses optimasi telah memenuhi kriteria numerik. Metode berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda karena masing-masing memiliki model teori, basis set, dan aproksimasi yang berbeda. Energi minimum berkaitan dengan geometri stabil karena struktur stabil adalah struktur yang berada pada minimum lokal permukaan energi potensial. Dalam rujukan praktikum kimia kuantum, hasil perhitungan harus dibaca secara kritis melalui konvergensi SCF, konvergensi optimasi, frekuensi imajiner, nilai energi, satuan, dan konsistensi metode sebelum interpretasi kimia dilakukan.

1. Mengapa Struktur Awal Perlu Dioptimasi?

Struktur awal perlu dioptimasi karena struktur yang dibuat secara manual, digambar melalui antarmuka visual, atau dihasilkan dari tebakan awal belum tentu merepresentasikan geometri kesetimbangan molekul. Dalam kimia komputasi, struktur awal hanyalah titik awal pada permukaan energi potensial. Ia dapat berada dekat dengan minimum energi, tetapi juga dapat berada jauh dari minimum. Jika struktur awal langsung digunakan untuk analisis tanpa optimasi, maka panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, momen dipol, orbital, frekuensi vibrasi, dan sifat lain dapat menjadi tidak valid.

Optimasi geometri bertujuan mengubah koordinat atom secara bertahap agar energi sistem menurun dan gaya pada atom mendekati nol. Struktur awal dapat memiliki energi tinggi karena beberapa alasan. Atom dapat terlalu dekat sehingga tolakan inti sangat besar. Atom dapat terlalu jauh sehingga ikatan tidak terbentuk secara wajar. Sudut ikatan dapat tidak sesuai dengan distribusi pasangan elektron. Konformasi dapat tidak stabil. Bahkan struktur yang tampak rapi dalam

visualizer belum tentu berada pada geometri energi rendah. Dalam dokumen rujukan praktikum, struktur awal yang buruk disebut dapat menyebabkan optimasi gagal atau menuju minimum yang tidak diinginkan, sehingga pemeriksaan kimiawi terhadap struktur awal, konformasi, dan keadaan spin sangat penting.

Secara konseptual, struktur awal perlu dioptimasi karena molekul adalah sistem yang energinya bergantung pada posisi inti atom. Ketika atom-atom digeser, energi berubah. Optimasi mencari susunan atom yang lebih stabil menurut metode tertentu. Jika mahasiswa menggambar H_2 dengan jarak H–H terlalu panjang, optimasi akan menggeser atom menuju jarak ikatan yang lebih wajar. Jika mahasiswa menggambar H_2O dengan sudut yang tidak sesuai, optimasi akan menyesuaikan posisi atom H terhadap atom O. Jika CH_4 digambar terlalu datar, optimasi dapat mengarahkannya menuju susunan tetrahedral jika input dan metode mendukung.

Jawaban yang baik untuk pertanyaan ini dapat ditulis sebagai berikut:

Struktur awal perlu dioptimasi karena struktur yang digambar secara manual belum tentu berada pada geometri kesetimbangan. Struktur awal hanya merupakan tebakan koordinat atom. Optimasi geometri mengubah posisi atom secara bertahap untuk mencari susunan dengan energi lebih rendah dan gaya yang lebih kecil. Jika struktur awal langsung dianalisis tanpa optimasi, panjang ikatan dan sudut ikatan dapat tidak merepresentasikan struktur stabil molekul.

Dalam konteks pembelajaran, pertanyaan ini melatih mahasiswa membedakan **struktur gambar** dan **struktur hasil optimasi**. Struktur gambar adalah tebakan. Struktur hasil optimasi adalah struktur yang telah diproses melalui algoritma pencarian energi minimum. Perbedaan ini mendasar dalam kimia komputasi.

Kesalahan umum yang harus dihindari adalah menjawab:

Struktur awal perlu dioptimasi agar gambarnya lebih bagus.

Jawaban tersebut terlalu visual dan tidak ilmiah. Optimasi bukan sekadar memperindah gambar, tetapi mencari struktur yang lebih rendah energinya menurut model komputasi.

2. Apa Arti Konvergensi?

Konvergensi adalah keadaan ketika proses perhitungan telah memenuhi kriteria numerik yang ditetapkan oleh software. Dalam optimasi geometri, konvergensi berarti perubahan energi, gradien energi, gaya pada atom, dan/atau perpindahan atom sudah cukup kecil sehingga software menghentikan proses optimasi. Dengan kata lain, struktur dianggap tidak lagi berubah secara signifikan dan sudah mendekati titik stasioner pada permukaan energi potensial.

Konvergensi tidak boleh dipahami sebagai sekadar “perhitungan selesai”. Suatu perhitungan dapat berhenti karena berbagai alasan: berhasil konvergen, mencapai batas iterasi maksimum, terjadi error input, gagal SCF, atau dihentikan oleh server. Oleh karena itu, mahasiswa harus membaca

pesan output secara teliti. Struktur akhir hanya boleh disebut sebagai geometri teroptimasi jika optimasi memang mencapai konvergensi.

Dalam optimasi geometri, ada dua jenis konvergensi yang sering perlu diperhatikan:

1. **Konvergensi SCF**, yaitu konvergensi perhitungan elektronik pada setiap geometri.
2. **Konvergensi optimasi geometri**, yaitu konvergensi perubahan koordinat atom menuju struktur optimum.

Keduanya penting. Jika SCF tidak konvergen, energi dan gradien yang digunakan untuk menggeser atom tidak dapat dipercaya. Jika optimasi geometri tidak konvergen, struktur terakhir belum dapat dianggap sebagai geometri kesetimbangan. Rujukan praktikum menjelaskan bahwa pada optimasi geometri, bukan hanya energi elektronik yang harus konvergen, tetapi juga gradien atau turunan pertama energi terhadap posisi atom.

Secara matematis, pada geometri kesetimbangan berlaku:

$$\partial E / \partial R_A = 0$$

Artinya, turunan energi terhadap koordinat inti mendekati nol. Dalam bahasa fisika, gaya pada inti mendekati nol karena gaya adalah negatif gradien energi:

$$F = -\nabla E$$

Jika gaya masih besar, atom masih terdorong untuk bergerak. Jika gradien sudah kecil, struktur mendekati titik stasioner.

Jawaban yang baik:

Konvergensi berarti proses optimasi telah memenuhi kriteria numerik yang ditetapkan software, seperti perubahan energi yang kecil, gradien energi yang kecil, dan perpindahan atom yang kecil. Struktur yang konvergen dapat dianalisis sebagai geometri akhir pada metode yang digunakan. Jika optimasi belum konvergen, koordinat terakhir belum boleh dianggap sebagai geometri kesetimbangan.

Mahasiswa juga harus memahami bahwa konvergensi optimasi belum selalu membuktikan bahwa struktur adalah minimum sejati. Suatu struktur dapat menjadi titik stasioner tetapi bukan minimum lokal; ia dapat berupa titik pelana. Untuk memastikan minimum, perhitungan frekuensi diperlukan. Pada minimum lokal semua frekuensi nyata, sedangkan pada titik sadel terdapat frekuensi imajiner.

Kesalahan umum yang harus dihindari adalah menyamakan “job finished” dengan “konvergen”. File output yang selesai dibuat belum tentu menunjukkan optimasi berhasil. Mahasiswa harus mencari indikator konvergensi dalam output.

3. Mengapa Metode Komputasi Berbeda Dapat Menghasilkan Geometri Berbeda?

Metode komputasi berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda karena setiap metode menggunakan pendekatan, aproksimasi, parameter, dan basis fungsi yang berbeda untuk menghitung energi molekul. Optimasi geometri mencari minimum pada permukaan energi potensial. Jika metode yang digunakan berbeda, maka permukaan energi potensial yang “dilihat” oleh software juga dapat berbeda. Akibatnya, titik minimum yang ditemukan dapat memiliki panjang ikatan dan sudut ikatan yang tidak identik.

Dalam kimia komputasi, metode seperti mekanika molekular, semiempiris, Hartree–Fock, DFT, MP2, coupled cluster, DFTB, atau xTB tidak menghitung energi dengan cara yang sama. Mekanika molekular menggunakan medan gaya dan parameter empiris. Semiempiris menyederhanakan banyak integral dan memakai parameter. Hartree–Fock memperlakukan interaksi elektron dalam pendekatan medan rata-rata dan tidak memasukkan korelasi elektron secara lengkap. DFT menggunakan kerapatan elektron dan fungsional aproksimasi. Metode korelasi pasca-Hartree–Fock memasukkan korelasi elektron dengan tingkat biaya komputasi yang lebih besar. Karena perbedaan tersebut, geometri yang dihasilkan dapat berbeda.

Basis set juga berpengaruh. Basis set kecil seperti STO-3G memberi representasi orbital yang terbatas, sehingga geometri dapat kurang akurat. Basis set lebih besar dapat memberi hasil lebih baik, tetapi membutuhkan waktu komputasi lebih lama. Selain itu, efek pelarut, koreksi dispersi, model korelasi, dan kondisi perhitungan juga dapat memengaruhi geometri.

Dalam rujukan praktikum, perbedaan antara hasil komputasi dan data rujukan perlu dianalisis dari sisi metode, basis set, korelasi elektron, efek pelarut, dan keterbatasan model. Ini menunjukkan bahwa perbedaan hasil antar metode bukan hal aneh, tetapi bagian dari sifat komputasi ilmiah.

Jawaban yang baik:

Metode komputasi berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda karena setiap metode membangun model energi molekul dengan aproksimasi yang berbeda. Hartree–Fock, DFT, semiempiris, dan mekanika molekular tidak memperlakukan elektron dan interaksi molekul dengan cara yang sama. Basis set yang berbeda juga mengubah fleksibilitas fungsi gelombang atau kerapatan elektron. Karena optimasi mencari minimum pada permukaan energi potensial yang ditentukan oleh metode tersebut, panjang ikatan dan sudut ikatan hasil optimasi dapat berbeda.

Mahasiswa harus menghindari jawaban yang terlalu sederhana seperti:

Metode berbeda menghasilkan geometri berbeda karena software-nya berbeda.

Jawaban itu belum tepat. Perbedaan utama bukan semata nama software, tetapi model teori, basis set, parameter, dan aproksimasi. Software berbeda dapat menghasilkan hasil serupa jika metode, basis set, dan pengaturan sama. Sebaliknya, software yang sama dapat menghasilkan geometri berbeda jika metode dan basis set berbeda.

4. Apa Hubungan Energi Minimum dengan Geometri Stabil?

Hubungan antara energi minimum dan geometri stabil merupakan inti dari optimasi geometri. Dalam kimia komputasi, geometri stabil adalah susunan atom yang berada pada minimum lokal permukaan energi potensial. Pada titik tersebut, energi lebih rendah dibandingkan struktur di sekitarnya, dan gaya pada atom mendekati nol. Karena itu, atom-atom tidak terdorong kuat untuk bergerak ke arah lain.

Permukaan energi potensial menggambarkan energi molekul sebagai fungsi koordinat inti. Jika struktur berada di lereng permukaan energi, gaya akan mendorong atom bergerak menuju arah penurunan energi. Jika struktur berada di lembah atau minimum lokal, perpindahan kecil ke berbagai arah akan menaikkan energi. Oleh karena itu, struktur pada minimum lokal dianggap stabil secara lokal.

Secara matematis, pada titik stasioner:

$$\nabla E = 0$$

Untuk minimum lokal, titik stasioner tersebut harus memiliki kelengkungan positif dalam semua arah relevan. Dalam praktik kimia komputasi, hal ini dapat diperiksa melalui perhitungan frekuensi. Jika semua frekuensi vibrasi nyata, struktur berada pada minimum lokal. Jika terdapat frekuensi imajiner, struktur mungkin merupakan titik pelana. Optimasi geometri hanya memberi energi pada titik stasioner, sedangkan frekuensi vibrasi membantu membedakan minimum dan titik sadel.

Jawaban yang baik:

Energi minimum berkaitan dengan geometri stabil karena struktur molekul yang stabil adalah struktur yang berada pada minimum lokal permukaan energi potensial. Pada geometri tersebut, gaya pada atom mendekati nol sehingga atom tidak terdorong kuat untuk berubah posisi. Jika struktur digeser sedikit dari minimum, energi cenderung meningkat. Oleh karena itu, optimasi geometri bertujuan mencari susunan atom dengan energi minimum lokal.

Mahasiswa perlu memahami kata **lokal**. Optimasi dari satu struktur awal biasanya mencari minimum lokal terdekat, bukan selalu minimum global. Pada molekul sederhana seperti H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 , masalah minimum lokal tidak terlalu rumit. Namun, pada molekul fleksibel yang memiliki banyak konformer, optimasi dari struktur awal berbeda dapat menghasilkan minimum lokal berbeda. Karena itu, struktur awal tetap penting.

Kesalahan umum yang harus dihindari adalah menyatakan:

Geometri stabil adalah geometri dengan energi paling rendah dari semua kemungkinan.

Pernyataan ini terlalu mutlak. Dalam praktik optimasi biasa, struktur yang ditemukan biasanya minimum lokal, bukan selalu minimum global. Untuk memastikan minimum global, diperlukan eksplorasi konformasi atau strategi pencarian yang lebih luas.

5. Contoh Jawaban Diskusi Terpadu

Berikut contoh jawaban terpadu yang menunjukkan hubungan antara empat pertanyaan utama. Mahasiswa boleh menggunakan pola ini, tetapi harus menyesuaikan dengan data hasil praktikum masing-masing.

Struktur awal perlu dioptimasi karena koordinat atom yang dibuat secara manual belum tentu berada pada geometri kesetimbangan. Struktur awal hanya merupakan tebakan pada permukaan energi potensial. Optimasi geometri mengubah posisi atom secara bertahap agar energi menurun dan gaya pada atom menjadi kecil.

Konvergensi berarti proses optimasi telah memenuhi kriteria numerik yang ditentukan software, seperti perubahan energi, gradien, dan perpindahan atom yang sudah berada di bawah ambang batas. Jika optimasi belum konvergen, struktur terakhir belum boleh dianggap sebagai geometri akhir yang sah.

Metode komputasi berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda karena setiap metode menggunakan pendekatan yang berbeda dalam menghitung energi molekul. Hartree-Fock, DFT, semiempiris, dan mekanika molekular memiliki asumsi dan tingkat aproksimasi berbeda. Basis set yang digunakan juga memengaruhi panjang ikatan dan sudut ikatan.

Energi minimum berkaitan dengan geometri stabil karena struktur stabil berada pada minimum lokal permukaan energi potensial. Pada titik tersebut, gaya pada atom mendekati nol. Jika struktur digeser sedikit, energi cenderung meningkat. Oleh karena itu, optimasi geometri mencari susunan atom yang berada pada minimum energi lokal.

Jawaban terpadu seperti ini baik karena tidak memisahkan konsep secara kaku. Ia menunjukkan bahwa struktur awal, optimasi, konvergensi, metode, dan energi minimum merupakan satu alur berpikir.

6. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik

Jawaban diskusi yang baik harus memenuhi beberapa kriteria akademik.

Kriteria	Penjelasan
Konseptual	Menjelaskan makna konsep, bukan hanya definisi singkat
Berbasis teori	Menghubungkan jawaban dengan PES, gradien, energi, dan VSEPR
Berbasis output	Mengaitkan jawaban dengan hasil optimasi, panjang ikatan, dan sudut ikatan
Kritis	Menyebut keterbatasan metode dan kemungkinan error
Proporsional	Tidak membuat klaim berlebihan
Reprodusibel	Menyebut pentingnya metode, basis set, input, output, dan konvergensi
Komunikatif	Ditulis dengan bahasa ilmiah tetapi mudah dipahami

Jawaban yang baik tidak harus panjang berlebihan, tetapi harus lengkap secara konsep. Jawaban yang hanya satu kalimat biasanya belum cukup. Misalnya, jawaban “konvergensi artinya selesai” tidak memenuhi standar karena tidak menjelaskan kriteria numerik. Jawaban “metode berbeda karena software berbeda” juga tidak cukup karena tidak membahas model teori dan basis set.

7. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi

Rubrik berikut dapat digunakan untuk menilai jawaban mahasiswa.

Skor	Kriteria
4	Jawaban benar, lengkap, argumentatif, mengaitkan teori, output, dan keterbatasan metode
3	Jawaban benar tetapi belum sepenuhnya mengaitkan teori dengan output praktikum
2	Jawaban sebagian benar tetapi masih dangkal atau ada kekurangan konsep
1	Jawaban sangat umum, tidak menjelaskan alasan, atau hanya mengulang istilah
0	Jawaban salah, kosong, atau tidak relevan

Penerapan rubrik:

- Untuk pertanyaan struktur awal, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan bahwa struktur awal adalah tebakan, dapat memiliki energi tinggi, perlu bergerak menuju minimum energi, dan harus diperiksa melalui optimasi.
- Untuk pertanyaan konvergensi, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan perubahan energi, gradien, perpindahan atom, SCF, dan bahwa struktur tidak konvergen belum sah.
- Untuk pertanyaan metode berbeda, skor 4 diberikan jika mahasiswa membahas metode, basis set, korelasi elektron, aproksimasi, dan konteks hasil.
- Untuk pertanyaan energi minimum, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan permukaan energi potensial, minimum lokal, gaya mendekati nol, dan hubungan dengan stabilitas geometri.

Rubrik ini membantu dosen menilai jawaban secara adil dan membantu mahasiswa memahami standar jawaban yang diharapkan.

8. Pertanyaan Pengayaan untuk Diskusi Lanjutan

Selain empat pertanyaan utama, dosen dapat memberikan pertanyaan pengayaan untuk memperdalam diskusi kelas. Pertanyaan pengayaan tidak wajib, tetapi berguna untuk mahasiswa yang ingin memahami optimasi geometri lebih jauh.

Beberapa pertanyaan pengayaan:

1. Apa perbedaan optimasi geometri dan perhitungan energi titik tunggal?

2. Mengapa struktur yang konvergen belum tentu minimum sejati?
3. Mengapa perhitungan frekuensi diperlukan setelah optimasi?
4. Apa arti frekuensi imajiner dalam validasi geometri?
5. Mengapa struktur awal yang buruk dapat menyebabkan optimasi gagal?
6. Apa perbedaan minimum lokal dan minimum global?
7. Mengapa basis set kecil dapat menghasilkan geometri yang kurang akurat?
8. Mengapa H₂O bengkok sedangkan CO₂ linear?
9. Mengapa CH₄ memiliki sudut mendekati tetrahedral?
10. Bagaimana hubungan geometri molekul dengan momen dipol?

Pertanyaan-pertanyaan ini dapat digunakan untuk diskusi kelompok, tugas refleksi, atau pengayaan laporan.

9. Kesalahan Konseptual yang Harus Dihindari

Dalam menjawab pertanyaan diskusi, mahasiswa harus menghindari beberapa kesalahan konseptual berikut.

Kesalahan	Koreksi
Optimasi hanya membuat gambar lebih rapi	Optimasi mencari struktur energi rendah berdasarkan metode komputasi
Konvergensi sama dengan file output selesai	Konvergensi berarti kriteria numerik terpenuhi
Struktur akhir selalu benar	Struktur akhir harus diperiksa konvergensi dan kewajarannya
Semua metode harus menghasilkan geometri sama	Metode dan basis set berbeda dapat menghasilkan geometri berbeda
Energi total antar molekul berbeda dapat dibandingkan langsung	Energi total absolut tidak boleh dibandingkan sembarangan antar molekul berbeda
Minimum yang ditemukan selalu minimum global	Optimasi biasa umumnya menemukan minimum lokal
Visualisasi cukup untuk analisis	Tabel panjang ikatan dan sudut ikatan tetap diperlukan
VSEPR harus sama persis dengan hasil komputasi	VSEPR bersifat kualitatif, sedangkan komputasi memberi nilai kuantitatif
Optimasi konvergen selalu minimum sejati	Perhitungan frekuensi diperlukan untuk memvalidasi minimum

Kesalahan-kesalahan tersebut harus dibahas secara eksplisit karena sering muncul pada mahasiswa pemula. Dalam kimia komputasi, kesalahan konsep dapat membuat output yang benar secara teknis ditafsirkan secara keliru.

10. Implikasi Pembelajaran Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi pada Praktikum 2 memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar bahwa struktur molekul bukan sekadar gambar, tetapi hasil dari prinsip energi. Kedua, mahasiswa belajar bahwa software kimia komputasi harus dibaca secara kritis. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa setiap hasil memiliki konteks metode dan basis set. Keempat, mahasiswa belajar bahwa konvergensi adalah syarat penting validitas hasil. Kelima, mahasiswa belajar bahwa stabilitas geometri berkaitan dengan minimum energi pada permukaan energi potensial.

Implikasi lain adalah pembentukan literasi komputasi. Mahasiswa yang memahami pertanyaan diskusi ini akan lebih siap menghadapi praktikum berikutnya. Pada Bab 6, mereka akan memahami mengapa basis set memengaruhi energi dan geometri. Pada Bab 7, mereka akan lebih siap memahami hubungan antara geometri dan orbital. Pada Bab 8, mereka akan memahami mengapa momen dipol bergantung pada bentuk molekul. Pada Bab 9, mereka akan memahami mengapa frekuensi vibrasi memerlukan geometri yang teroptimasi. Dengan demikian, Praktikum 2 menjadi fondasi bagi seluruh praktikum struktur elektronik berikutnya.

11. Penutup Subbab dan Arah Setelah Bab 5

Subbab 5.10 menutup rangkaian Praktikum 2 tentang optimasi geometri molekul sederhana. Melalui pertanyaan diskusi, mahasiswa diarahkan untuk menghubungkan struktur awal, optimasi, konvergensi, metode komputasi, energi minimum, dan geometri stabil. Jika mahasiswa dapat menjawab empat pertanyaan utama dengan benar, berarti mereka telah memahami prinsip dasar optimasi geometri, bukan hanya menjalankan software.

Setelah subbab ini, Bab 5 secara substansi telah menyelesaikan seluruh rangkaian praktikum: tujuan, dasar teori, software, molekul model, jalur ChemCompute, jalur Python mandiri, nama file kode, output kode, analisis, dan pertanyaan diskusi. Tahap berikutnya adalah penutupan Bab 5 yang dapat memuat ringkasan bab, sintesis gagasan utama, implikasi keilmuan, implikasi praktis, keterbatasan pembahasan, arah menuju bab berikutnya, dan daftar pustaka Bab 5 apabila diminta pada instruksi berikutnya.

Penutup Bab 5

Bab 5 telah membahas Praktikum 2 tentang **optimasi geometri molekul sederhana**. Bab ini menjadi tahap penting setelah mahasiswa mempelajari model partikel dalam kotak pada Bab 4. Jika Bab 4 menekankan model kuantum ideal satu dimensi, maka Bab 5 membawa mahasiswa memasuki sistem molekul nyata yang memiliki atom, ikatan, sudut ikatan, energi total, koordinat tiga dimensi, dan status konvergensi.

Inti Bab 5 adalah pemahaman bahwa struktur molekul tidak boleh diperlakukan hanya sebagai gambar. Struktur molekul adalah susunan atom yang harus dianalisis berdasarkan energi, gaya, panjang ikatan, sudut ikatan, dan kestabilan geometri. Struktur yang digambar secara manual di

Avogadro atau editor molekul lain hanyalah **struktur awal**. Struktur tersebut perlu dioptimasi agar mendekati geometri kesetimbangan pada tingkat teori komputasi tertentu.

Dalam praktikum ini, mahasiswa diarahkan untuk mengerjakan lima molekul model: **H₂, H₂O, NH₃, CH₄, dan CO₂**. Kelima molekul ini dipilih karena mewakili bentuk geometri dasar: diatomik, bengkok, trigonal piramida, tetrahedral, dan linear. Dengan molekul-molekul tersebut, mahasiswa dapat mempelajari optimasi geometri secara bertahap, dari kasus paling sederhana menuju struktur yang memiliki sudut ikatan dan simetri lebih kompleks.

Ringkasan Bab

Bab 5 dimulai dengan penjelasan tujuan praktikum. Mahasiswa diharapkan mampu membangun struktur awal molekul, menjalankan optimasi geometri, membaca file output, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membandingkan geometri awal dan akhir, serta menilai status konvergensi.

Dasar teori bab ini membahas **permukaan energi potensial, gradien energi, titik minimum, dan geometri kesetimbangan**. Optimasi geometri dijelaskan sebagai proses pencarian titik minimum lokal pada permukaan energi potensial. Struktur dianggap layak dianalisis jika optimasi mencapai konvergensi. Jika belum konvergen, koordinat akhir belum boleh langsung dianggap sebagai geometri kesetimbangan.

Software yang digunakan meliputi **ChemCompute, Avogadro, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan Python**. Avogadro digunakan untuk membangun struktur awal. ChemCompute memudahkan akses perhitungan berbasis web. GAMESS, ORCA, Gaussian, dan Psi4 berfungsi sebagai mesin perhitungan struktur elektronik. Python digunakan untuk analisis pascaproses, terutama membaca file XYZ, menghitung panjang ikatan, menghitung sudut ikatan, membuat tabel, dan membuat plot struktur 3D sederhana.

Jalur ChemCompute memberi mahasiswa pengalaman menjalankan optimasi geometri melalui platform web. Jalur Python mandiri melatih mahasiswa mengolah koordinat hasil optimasi menjadi data geometri yang dapat dianalisis. File kode utama ditetapkan sebagai:

```
praktikum_02_optimasi_geometri.py
```

Output kode meliputi tabel panjang ikatan, tabel sudut ikatan, gambar struktur 3D sederhana, perbandingan geometri awal dan akhir, serta file CSV hasil analisis geometri. Analisis kemudian dilakukan dengan membandingkan hasil optimasi terhadap teori VSEPR dan data literatur.

Sintesis Gagasan Utama Bab 5

Gagasan utama Bab 5 dapat dirumuskan sebagai berikut: **geometri molekul adalah hasil keseimbangan energi**. Molekul stabil bukan sekadar molekul yang gambarnya tampak rapi, tetapi molekul yang susunan atomnya berada pada titik energi rendah menurut metode komputasi yang digunakan.

Optimasi geometri mengajarkan bahwa struktur molekul memiliki dasar fisik. Panjang ikatan muncul dari keseimbangan antara tarikan dan tolakan. Sudut ikatan berkaitan dengan distribusi elektron dan tolakan pasangan elektron. Bentuk molekul dapat dipahami dengan teori VSEPR, tetapi hasil komputasi memberi data numerik yang lebih rinci.

Bab ini juga menekankan bahwa hasil komputasi harus dibaca secara kritis. Konvergensi harus diperiksa. Metode dan basis set harus dicatat. Output harus disimpan. Tabel harus memiliki satuan. Gambar harus dilengkapi analisis. Hasil tidak boleh diperlakukan sebagai kebenaran mutlak, tetapi sebagai hasil dari model teori tertentu.

Dengan demikian, Bab 5 membangun fondasi kerja kimia komputasi yang benar: **membuat struktur, menjalankan optimasi, memeriksa konvergensi, menganalisis geometri, membandingkan dengan teori, dan menulis interpretasi ilmiah**.

Implikasi Keilmuan

Secara keilmuan, Bab 5 memperlihatkan bahwa bentuk molekul dapat dihitung, dianalisis, dan divalidasi. Mahasiswa tidak hanya menghafal bahwa H_2O bengkok, NH_3 trigonal piramida, CH_4 tetrahedral, dan CO_2 linear. Mereka belajar membuktikan bentuk tersebut melalui koordinat, panjang ikatan, sudut ikatan, energi total, dan optimasi geometri.

Bab ini juga memperkuat pemahaman hubungan antara teori kimia dasar dan kimia komputasi. Teori VSEPR memberi prediksi kualitatif, sedangkan optimasi geometri memberi nilai kuantitatif. Keduanya saling melengkapi. Jika hasil optimasi sesuai dengan VSEPR, mahasiswa memperoleh penguatan konsep. Jika hasil berbeda, mahasiswa belajar memeriksa input, metode, basis set, konvergensi, dan keterbatasan model.

Optimasi geometri juga menjadi prasyarat bagi perhitungan lanjutan. Struktur yang belum dioptimasi dapat menghasilkan energi, orbital, momen dipol, dan frekuensi vibrasi yang tidak valid. Karena itu, Bab 5 berfungsi sebagai fondasi bagi praktikum berikutnya tentang Hartree–Fock, basis set, DFT, HOMO-LUMO, momen dipol, simetri, spektrum IR, dan energi reaksi.

Implikasi Praktis

Secara praktis, mahasiswa memperoleh keterampilan teknis penting. Mereka belajar membuat struktur awal, menyimpan file XYZ, menjalankan optimasi, mengunduh output, mengambil koordinat akhir, dan menganalisis hasil dengan Python. Keterampilan ini sangat penting karena kimia komputasi modern tidak hanya bergantung pada satu software, tetapi pada alur kerja yang menghubungkan banyak alat.

Bab ini juga membiasakan mahasiswa bekerja secara tertib. File input, output, data, gambar, kode, dan laporan harus disimpan dalam folder yang jelas. Nama file harus konsisten. Output harus dapat ditelusuri kembali ke kode. Tabel dan gambar harus berasal dari hasil komputasi yang sah.

Kebiasaan ini akan sangat berguna dalam penelitian. Dalam skripsi, tesis, artikel ilmiah, atau laporan proyek, hasil komputasi harus dapat direproduksi. Pembaca harus dapat mengetahui struktur awal, metode, basis set, software, parameter, output, dan cara analisis. Bab 5 membangun kebiasaan tersebut sejak praktikum dasar.

Keterbatasan Pembahasan Bab 5

Bab 5 masih memiliki beberapa keterbatasan yang perlu disadari. Pertama, molekul yang digunakan adalah molekul kecil dan sederhana. Molekul seperti H_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , dan CO_2 sangat baik untuk pembelajaran dasar, tetapi belum mewakili kompleksitas molekul besar, biomolekul, katalis, ion logam, radikal, atau sistem berkorelasi kuat.

Kedua, praktikum ini belum membahas pencarian minimum global secara mendalam. Optimasi biasa umumnya menemukan minimum lokal yang dekat dengan struktur awal. Pada molekul fleksibel, struktur awal berbeda dapat menuju minimum lokal berbeda. Untuk mencari minimum global diperlukan eksplorasi konformasi yang lebih luas.

Ketiga, validasi frekuensi belum menjadi fokus utama. Padahal, secara teoritis, struktur yang benar-benar merupakan minimum lokal sebaiknya divalidasi dengan perhitungan frekuensi. Semua frekuensi nyata menunjukkan minimum lokal, sedangkan frekuensi imajiner menunjukkan titik pelana. Pembahasan ini akan menjadi lebih penting pada praktikum spektrum IR dan frekuensi vibrasi.

Keempat, akurasi geometri bergantung pada metode dan basis set. Metode sederhana seperti HF/STO-3G dapat dipakai untuk pembelajaran prosedur, tetapi belum tentu menghasilkan geometri paling akurat. Oleh karena itu, hasil praktikum harus ditafsirkan sebagai latihan konseptual dan metodologis, bukan sebagai prediksi struktur presisi tinggi.

Arah Menuju Bab Berikutnya

Setelah memahami optimasi geometri, mahasiswa siap memasuki pembahasan metode struktur elektronik yang lebih formal. Bab berikutnya akan membawa mahasiswa memahami bagaimana pilihan metode dan basis set memengaruhi hasil perhitungan. Optimasi geometri pada Bab 5 menjadi dasar karena semua perhitungan lanjutan membutuhkan struktur molekul yang layak.

Jika geometri molekul belum benar, maka energi elektronik, distribusi muatan, orbital molekul, momen dipol, dan frekuensi vibrasi juga dapat menyesatkan. Karena itu, Bab 5 harus dipahami sebagai fondasi praktikum kimia kuantum. Mahasiswa yang mampu membaca dan menganalisis hasil optimasi geometri akan lebih siap memahami perhitungan Hartree–Fock, basis set, DFT, HOMO-LUMO, simetri molekul, dan spektrum IR pada bab-bab berikutnya.

Daftar Pustaka Bab 5

Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular Quantum Mechanics* (5th ed.). Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Foresman, J. B., & Frisch, A. E. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Gordon, M. S., & Schmidt, M. W. (2005). Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later. In C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, & G. E. Scuseria (Eds.), *Theory and Applications of Computational Chemistry: The First Forty Years* (pp. 1167–1189). Elsevier.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.

Parr, R. G., & Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press.

Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications.

Bab 5 ini selesai. Ketik ‘lanjut’ atau ‘ya’ untuk melanjutkan ke Bab 6.

BAB 6

PRAKTIKUM 3: HARTREE–FOCK, FUNGSI BASIS, DAN ENERGI TOTAL MOLEKUL

Pengantar Bab 6

Bab 6 memasuki tahap praktikum yang lebih mendasar dalam kimia kuantum komputasi, yaitu memahami hubungan antara **metode Hartree–Fock**, **fungsi basis**, dan **energi total molekul**. Jika Bab 5 menekankan optimasi geometri sebagai proses mencari struktur molekul yang stabil, maka Bab 6 memperluas pemahaman mahasiswa pada pertanyaan yang lebih metodologis: *bagaimana pilihan metode dan basis set memengaruhi energi total, panjang ikatan, serta biaya komputasi?*

Hartree–Fock merupakan salah satu metode dasar dalam kimia kuantum *ab initio*. Metode ini sangat penting karena menjadi fondasi bagi banyak metode struktur elektronik modern. Dalam Hartree–Fock, elektron tidak diperlakukan sebagai partikel yang bergerak bebas tanpa interaksi, tetapi sebagai elektron yang bergerak dalam medan efektif rata-rata yang dibentuk oleh inti dan elektron-elektron lain. Pendekatan ini menghasilkan prosedur **self-consistent field** atau SCF, yaitu proses iteratif untuk memperoleh orbital molekul dan energi elektronik yang konsisten. Metode Hartree–Fock menjadi dasar penggunaan orbital atom dan orbital molekul dalam sistem banyak elektron.

Namun, Hartree–Fock tidak berdiri sendiri. Dalam praktik komputasi, metode ini selalu dipasangkan dengan **fungsi basis**. Basis set adalah kumpulan fungsi matematika yang digunakan untuk merepresentasikan orbital molekul. Karena orbital molekul tidak dihitung sebagai fungsi eksak yang tak terbatas, maka ia didekati sebagai kombinasi linear dari fungsi-fungsi basis. Roothaan memperkenalkan cara merepresentasikan orbital Hartree–Fock sebagai kombinasi linear fungsi basis sehingga persamaan Hartree–Fock dapat diubah menjadi masalah matriks yang cocok dikerjakan komputer.

Bab ini penting karena mahasiswa sering menulis “menggunakan metode Hartree–Fock” tanpa menyebut basis set. Padahal, HF/STO-3G, HF/3-21G, HF/6-31G, HF/6-31G(d), dan HF/cc-pVDZ bukan perhitungan yang sama. Hasil energi total, panjang ikatan, waktu komputasi, dan kualitas deskripsi elektronik dapat berbeda. Rujukan pembelajaran kimia komputasi menekankan bahwa Hartree–Fock dengan basis set minimal dapat memberi gambaran kualitatif, tetapi geometri dan energi dapat kurang akurat; basis set lebih besar memberi fleksibilitas lebih baik, tetapi biaya komputasi meningkat.

Pada Bab 6, mahasiswa akan mempelajari cara menjalankan perhitungan **single point energy** dan **optimasi geometri** dengan variasi basis set. Molekul model yang digunakan adalah **H₂**, **LiH**, **HF**, **H₂O**, dan **CH₄**. Molekul-molekul ini dipilih karena sederhana, tetapi cukup representatif untuk memperlihatkan pengaruh ukuran basis set terhadap energi total dan parameter geometri. Mahasiswa akan membandingkan hasil dari beberapa basis set, menyusun tabel energi, membuat

grafik energi terhadap ukuran basis set, menghitung selisih energi antar basis set, serta menilai kompromi antara akurasi dan waktu komputasi.

Dengan demikian, Bab 6 tidak hanya mengajarkan cara menjalankan Hartree–Fock. Bab ini melatih mahasiswa memahami bahwa setiap hasil komputasi selalu lahir dari keputusan metodologis. Pilihan metode, basis set, molekul model, jenis job, dan parameter komputasi akan menentukan kualitas hasil. Dalam kimia komputasi, angka energi tidak boleh dibaca tanpa konteks. Energi total harus selalu dihubungkan dengan metode, basis set, konvergensi, dan tujuan perhitungan.

6.1 Tujuan Praktikum

Tujuan Praktikum 3 adalah agar mahasiswa memahami **pengaruh metode Hartree–Fock dan fungsi basis terhadap energi total, panjang ikatan, dan biaya komputasi**. Tujuan ini bukan hanya bersifat teknis, tetapi juga konseptual dan metodologis. Mahasiswa tidak hanya diminta menjalankan perhitungan HF dengan beberapa basis set, tetapi juga menafsirkan mengapa hasilnya berubah, apa makna perubahan energi total, mengapa basis set lebih besar biasanya memberi energi yang lebih rendah, dan mengapa peningkatan akurasi memerlukan biaya komputasi yang lebih besar.

Secara umum, setelah menyelesaikan praktikum ini, mahasiswa diharapkan mampu:

1. Menjelaskan prinsip dasar metode Hartree–Fock secara konseptual.
2. Menjelaskan fungsi basis set dalam merepresentasikan orbital molekul.
3. Menjalankan perhitungan energi total menggunakan metode Hartree–Fock.
4. Membandingkan hasil energi total dari beberapa basis set.
5. Membandingkan panjang ikatan hasil optimasi dengan basis set berbeda.
6. Mencatat jumlah fungsi basis dan waktu komputasi.
7. Menyusun tabel metode, basis set, energi total, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi.
8. Membuat grafik energi total terhadap ukuran basis set.
9. Membuat grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set.
10. Menilai kompromi antara akurasi dan biaya komputasi.
11. Menjelaskan keterbatasan Hartree–Fock, terutama terkait korelasi elektron.
12. Menulis kesimpulan praktikum secara kritis dan tidak berlebihan.

Tujuan-tujuan tersebut harus dipahami sebagai satu kesatuan. Mahasiswa tidak cukup hanya memperoleh tabel energi. Mereka harus memahami bahwa tabel energi menunjukkan konsekuensi dari pilihan basis set. Mahasiswa tidak cukup hanya membuat grafik energi terhadap basis set. Mereka harus menjelaskan mengapa grafik tersebut cenderung mendekati nilai tertentu. Mahasiswa tidak cukup hanya mencatat waktu komputasi. Mereka harus menganalisis mengapa basis set lebih besar memerlukan waktu lebih lama. Praktikum ini melatih mahasiswa melihat hubungan antara **model teori, representasi matematika, hasil numerik, dan biaya komputasi**.

1. Memahami Hartree–Fock sebagai Metode Dasar Ab Initio

Tujuan pertama praktikum ini adalah memahami Hartree–Fock sebagai metode dasar ab initio. Istilah *ab initio* berarti perhitungan didasarkan pada prinsip mekanika kuantum dan konstanta fisik dasar, bukan parameter empiris yang disesuaikan untuk setiap molekul. Namun, *ab initio* tidak berarti eksak. Hartree–Fock tetap menggunakan beberapa aproksimasi penting, terutama aproksimasi Born–Oppenheimer, pendekatan satu determinan Slater, basis set terbatas, dan medan rata-rata elektron. Rujukan pembelajaran yang digunakan dalam buku ini menekankan bahwa Hartree–Fock adalah metode ab initio, tetapi bukan penyelesaian eksak karena tetap memakai aproksimasi dan basis set terbatas.

Dalam Hartree–Fock, elektron-elektron dalam molekul tidak diselesaikan secara eksak sebagai sistem banyak elektron penuh. Sebaliknya, setiap elektron dianggap bergerak dalam medan efektif yang dibentuk oleh inti dan distribusi rata-rata elektron lain. Ide ini menghasilkan prosedur iteratif yang disebut SCF. Pada setiap iterasi, orbital molekul diperbarui sampai medan yang digunakan untuk menghitung orbital konsisten dengan distribusi elektron yang dihasilkan oleh orbital tersebut.

Tujuan praktikum ini bukan meminta mahasiswa menurunkan seluruh persamaan Hartree–Fock secara matematis. Tujuan praktikum adalah agar mahasiswa memahami makna praktisnya: ketika mereka memilih HF dalam software, mereka sedang memilih model teori tertentu yang mendeskripsikan elektron dengan pendekatan medan rata-rata dan satu determinan. Dengan pemahaman ini, mahasiswa tidak memperlakukan HF sebagai sekadar kata kunci input, tetapi sebagai metode dengan asumsi dan batas yang jelas.

2. Memahami Fungsi Basis sebagai Representasi Orbital Molekul

Tujuan kedua adalah memahami fungsi basis. Fungsi basis adalah kumpulan fungsi matematika yang digunakan untuk membangun orbital molekul. Dalam perhitungan molekul, orbital molekul biasanya ditulis sebagai kombinasi linear dari fungsi basis. Secara konseptual:

orbital molekul = kombinasi linear fungsi basis

atau secara simbolik:

$$\psi_i = c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + c_3\chi_3 + \dots + c_n\chi_n$$

dengan χ sebagai fungsi basis dan c sebagai koefisien yang dicari melalui prosedur SCF.

Jika basis set kecil, orbital molekul hanya memiliki ruang matematis yang terbatas untuk menyesuaikan bentuknya. Jika basis set lebih besar, orbital memiliki fleksibilitas lebih tinggi untuk menggambarkan distribusi elektron. Karena itu, basis set lebih besar umumnya dapat

menghasilkan energi yang lebih rendah dalam kerangka variasional, meskipun biaya komputasi meningkat. Basis set merupakan komponen kunci metode *ab initio* karena menentukan representasi matematis orbital molekul; minimal basis set berguna untuk pembelajaran cepat, split-valence basis memberi fleksibilitas lebih besar pada elektron valensi, fungsi polarisasi memungkinkan orbital menyesuaikan arah dan bentuk, sedangkan fungsi difusi penting untuk elektron yang menyebar.

Dalam praktikum ini, mahasiswa harus memahami bahwa basis set bukan aksesori tambahan. Basis set adalah bagian inti dari perhitungan. Menulis “Hartree–Fock” tanpa menyebut basis set belum lengkap. HF/STO-3G dan HF/6-31G(d) tidak boleh diperlakukan sebagai hasil yang sama karena basis set yang digunakan berbeda.

3. Memahami Energi Total Molekul

Tujuan ketiga adalah memahami energi total molekul. Energi total dalam perhitungan Hartree–Fock biasanya dinyatakan dalam satuan Hartree. Energi ini mencakup kontribusi energi elektronik dan interaksi inti pada geometri tertentu dalam tingkat teori tertentu. Dalam praktikum ini, energi total digunakan untuk membandingkan hasil perhitungan dengan basis set berbeda pada molekul yang sama.

Mahasiswa harus memahami dua hal penting. Pertama, energi total absolut tidak boleh dibandingkan sembarangan antar molekul berbeda. Energi total H₂O tidak dapat dibandingkan langsung dengan energi total CH₄ untuk menyimpulkan mana yang “lebih stabil” karena jumlah atom, jumlah elektron, dan komposisi molekul berbeda. Kedua, energi total dapat dibandingkan untuk molekul yang sama jika metode dan kondisi perhitungannya dijelaskan dengan baik.

Contoh perbandingan yang tepat:

Energi total H₂O dihitung dengan HF/STO-3G, HF/3-21G, HF/6-31G, dan HF/6-31G(d). Nilai energi kemudian dibandingkan untuk melihat pengaruh basis set terhadap hasil Hartree–Fock.

Contoh perbandingan yang kurang tepat:

Energi total H₂O lebih rendah daripada energi total H₂, maka H₂O lebih stabil.

Pernyataan kedua keliru karena membandingkan molekul yang berbeda komposisi. Dalam praktikum ini, energi total harus digunakan secara metodologis: untuk melihat pengaruh basis set pada molekul yang sama, bukan untuk membuat klaim stabilitas umum antar molekul berbeda.

4. Memahami Pengaruh Basis Set terhadap Energi Total

Tujuan keempat adalah memahami pengaruh basis set terhadap energi total. Dalam prinsip variasional, jika ruang fungsi trial diperluas, energi yang diperoleh tidak seharusnya lebih tinggi daripada energi terbaik dalam ruang yang lebih kecil, selama perbandingan dilakukan secara konsisten. Dalam konteks praktikum sederhana, mahasiswa diharapkan melihat kecenderungan bahwa basis set yang lebih besar sering menghasilkan energi Hartree–Fock yang lebih rendah atau mendekati batas tertentu.

Namun, mahasiswa harus hati-hati. Pernyataan “basis set lebih besar selalu lebih baik” perlu diberi batas. Basis set lebih besar memang memberi fleksibilitas matematis lebih besar, tetapi tidak selalu berarti semua sifat menjadi lebih baik secara praktis jika metode dasarnya memiliki keterbatasan. Hartree–Fock tetap belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Jadi, memperbesar basis set tidak otomatis menyelesaikan semua kesalahan metode. Hartree–Fock memasukkan efek pertukaran secara tepat dalam batas satu determinan, tetapi belum memasukkan korelasi dinamis antar elektron dengan spin berlawanan secara memadai.

Dengan kata lain, ada dua jenis keterbatasan yang harus dibedakan:

Jenis Keterbatasan	Penjelasan
Keterbatasan basis set	Orbital molekul belum direpresentasikan cukup fleksibel
Keterbatasan metode	Model Hartree–Fock belum memasukkan korelasi elektron lengkap

Praktikum 3 terutama menyoroti keterbatasan basis set, tetapi tetap memperkenalkan bahwa Hartree–Fock sendiri memiliki keterbatasan teori.

5. Memahami Pengaruh Basis Set terhadap Panjang Ikatan

Tujuan kelima adalah memahami pengaruh basis set terhadap panjang ikatan. Pada Bab 5, mahasiswa telah mempelajari optimasi geometri. Pada Bab 6, mahasiswa melihat bahwa hasil optimasi geometri dapat berubah ketika basis set berubah. Basis set yang lebih kecil mungkin memberi panjang ikatan yang berbeda dari basis set lebih besar karena representasi orbitalnya terbatas.

Contoh pada H_2 :

H_2 dihitung dengan HF/STO-3G, HF/3-21G, dan HF/6-31G. Panjang ikatan H–H hasil optimasi dibandingkan untuk melihat apakah perubahan basis set memengaruhi geometri kesetimbangan.

Contoh pada HF:

Molekul HF dihitung dengan beberapa basis set. Panjang ikatan H–F dibandingkan untuk melihat pengaruh fleksibilitas fungsi basis pada ikatan polar.

Analisis panjang ikatan harus dikaitkan dengan basis set. Jika basis set terlalu kecil, orbital tidak cukup fleksibel untuk menggambarkan distribusi elektron di sekitar ikatan. Akibatnya, panjang ikatan dapat berbeda dari hasil basis set yang lebih besar atau data literatur. Namun, mahasiswa harus memahami bahwa perubahan basis set bukan satu-satunya faktor; metode Hartree–Fock juga memiliki keterbatasan korelasi elektron.

6. Memahami Biaya Komputasi

Tujuan keenam adalah memahami biaya komputasi. Biaya komputasi adalah sumber daya yang diperlukan untuk menjalankan perhitungan, terutama waktu proses, memori, dan kapasitas penyimpanan. Dalam praktikum ini, biaya komputasi disederhanakan terutama sebagai **waktu komputasi**.

Basis set yang lebih besar meningkatkan jumlah fungsi basis. Jumlah fungsi basis yang lebih banyak membuat ukuran matriks dalam perhitungan Hartree–Fock menjadi lebih besar. Akibatnya, waktu komputasi meningkat. Mahasiswa harus melihat bahwa akurasi dan biaya komputasi berada dalam hubungan kompromi.

Secara sederhana:

```
basis set lebih besar
→ jumlah fungsi basis lebih banyak
→ matriks lebih besar
→ waktu komputasi lebih lama
→ hasil energi biasanya lebih baik
```

Namun, “lebih baik” tidak boleh dipahami tanpa batas. Jika basis set diperbesar terus, biaya komputasi dapat meningkat tajam, sedangkan perubahan energi mungkin semakin kecil. Inilah yang disebut konvergensi basis set secara praktis. Mahasiswa harus belajar menilai kapan peningkatan basis set masih memberi manfaat bermakna dan kapan biaya tambahannya tidak sebanding dengan perubahan hasil.

Tujuan ini sangat penting karena kimia komputasi selalu melibatkan kompromi. Dalam penelitian nyata, pilihan metode dan basis set tidak hanya ditentukan oleh akurasi, tetapi juga oleh ukuran molekul, sumber daya komputer, tujuan perhitungan, dan waktu yang tersedia.

7. Memahami Single Point Energy dan Optimasi Geometri

Tujuan ketujuh adalah membedakan **single point energy** dan **optimasi geometri** dalam konteks Hartree–Fock dan basis set.

Single point energy adalah perhitungan energi pada geometri tertentu tanpa mengubah posisi atom. Optimasi geometri adalah perhitungan yang mengubah posisi atom sampai struktur mencapai kriteria minimum energi. Dalam Praktikum 3, keduanya dapat digunakan untuk tujuan berbeda.

Jenis Perhitungan	Fungsi	Geometri Berubah?
Single point energy	Menghitung energi pada struktur tertentu	Tidak
Optimasi geometri	Mencari struktur energi rendah	Ya

Mahasiswa dapat menjalankan single point energy pada geometri yang sama dengan beberapa basis set untuk melihat pengaruh basis set terhadap energi total tanpa pengaruh perubahan geometri. Mahasiswa juga dapat menjalankan optimasi geometri dengan beberapa basis set untuk melihat pengaruh basis set terhadap panjang ikatan dan geometri akhir.

Dengan membedakan keduanya, mahasiswa memahami bahwa perubahan energi dapat berasal dari dua faktor:

1. Perubahan basis set.
2. Perubahan geometri.

Jika ingin membandingkan basis set secara langsung pada geometri yang sama, gunakan single point energy. Jika ingin melihat bagaimana basis set memengaruhi struktur optimum, gunakan optimasi geometri.

8. Molekul Model sebagai Sarana Pembelajaran

Praktikum 3 menggunakan molekul model:

1. **H₂**
2. **LiH**
3. **HF**
4. **H₂O**
5. **CH₄**

Molekul-molekul ini dipilih karena sederhana tetapi memiliki karakter ikatan berbeda. H₂ adalah molekul kovalen nonpolar paling sederhana. LiH memperkenalkan karakter ionik-polar sederhana. HF memperkenalkan ikatan polar kuat. H₂O memperkenalkan molekul bengkok dengan pasangan elektron bebas. CH₄ memperkenalkan molekul tetrahedral dengan simetri tinggi.

Tabel tujuan molekul model:

Molekul	Fokus Pembelajaran
H ₂	Pengaruh basis set pada energi dan panjang ikatan sederhana

LiH	Ikatan polar dan distribusi elektron antara atom ringan
HF	Ikatan sangat polar dan pengaruh basis pada atom elektronegatif
H ₂ O	Energi dan geometri molekul bengkok
CH ₄	Molekul simetris dengan beberapa ikatan setara

Dengan lima molekul ini, mahasiswa dapat melihat bahwa pengaruh basis set tidak selalu tampak sama pada semua sistem. Molekul yang lebih banyak elektron atau lebih polar dapat menunjukkan kebutuhan basis set yang lebih fleksibel.

9. Tujuan Operasional Praktikum

Secara operasional, mahasiswa harus menghasilkan beberapa produk praktikum:

1. File input perhitungan untuk setiap molekul.
2. File output dari setiap perhitungan.
3. Tabel energi total untuk beberapa basis set.
4. Tabel jumlah fungsi basis.
5. Tabel waktu komputasi.
6. Tabel panjang ikatan jika optimasi geometri dilakukan.
7. Grafik energi terhadap ukuran basis set.
8. Grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set.
9. File CSV hasil analisis.
10. Ringkasan basis set yang paling efisien.

Produk-produk ini harus disusun secara sistematis. Praktikum tidak selesai hanya dengan memperoleh energi dari software. Energi harus dikumpulkan, ditabelkan, divisualisasikan, dan dianalisis. Dengan demikian, mahasiswa belajar membangun argumen dari data.

Contoh tabel awal yang diharapkan:

Molekul	Metode	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis	Energi Total	Waktu Komputasi
H ₂ O	HF	STO-3G	...	...	...
H ₂ O	HF	3-21G	...	...	...
H ₂ O	HF	6-31G	...	...	...
H ₂ O	HF	6-31G(d)	...	...	...

Tabel tersebut akan menjadi bahan utama untuk analisis pada subbab 6.9.

10. Indikator Keberhasilan Praktikum

Mahasiswa dianggap berhasil dalam Praktikum 3 jika memenuhi indikator berikut:

1. Dapat menjelaskan makna Hartree–Fock secara konseptual.
2. Dapat menjelaskan makna basis set.
3. Dapat menjalankan perhitungan HF dengan beberapa basis set.
4. Dapat mencatat energi total dengan satuan yang benar.
5. Dapat mencatat jumlah fungsi basis.
6. Dapat mencatat waktu komputasi.
7. Dapat membandingkan energi total antar basis set.
8. Dapat membuat grafik energi terhadap basis set.
9. Dapat membuat grafik waktu komputasi terhadap basis set.
10. Dapat menjelaskan kompromi antara akurasi dan biaya komputasi.
11. Dapat menyebut keterbatasan Hartree–Fock.
12. Dapat menulis kesimpulan yang tidak berlebihan.

Indikator ini menegaskan bahwa praktikum tidak hanya mengejar hasil angka. Praktikum ini bertujuan membangun literasi metode. Mahasiswa harus memahami bahwa setiap angka energi bergantung pada pilihan teori dan basis set.

11. Analisis Kritis terhadap Tujuan Praktikum

Tujuan Praktikum 3 perlu dipahami secara kritis. Praktikum ini tidak bertujuan membuktikan bahwa basis set terbesar selalu harus dipakai. Dalam praktik nyata, basis set terbesar tidak selalu praktis, terutama untuk molekul besar. Tujuan praktikum adalah memahami pola: basis set lebih besar biasanya memberi energi lebih rendah dan deskripsi orbital lebih fleksibel, tetapi memerlukan biaya komputasi lebih tinggi. Oleh karena itu, mahasiswa harus belajar memilih basis set sesuai tujuan.

Praktikum ini juga tidak bertujuan menyatakan bahwa Hartree–Fock adalah metode paling akurat. Hartree–Fock penting sebagai dasar, tetapi memiliki keterbatasan. Ia memasukkan exchange untuk elektron spin sama dalam batas satu determinan, tetapi belum menangkap korelasi elektron dinamis secara lengkap. Karena itu, energi Hartree–Fock dapat lebih tinggi daripada energi yang diperoleh dengan metode berkorelasi pada basis set yang sama.

Dengan demikian, mahasiswa harus mengambil sikap seimbang. Hartree–Fock bukan metode “buruk” yang harus ditinggalkan, tetapi juga bukan metode “sempurna” yang selalu cukup. Ia adalah metode dasar yang sangat penting untuk memahami struktur elektronik, SCF, orbital molekul, basis set, dan batas metode *ab initio*.

12. Implikasi Pembelajaran

Praktikum 3 memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar bahwa hasil komputasi bergantung pada representasi matematis. Kedua, mahasiswa memahami bahwa energi total bukan angka tunggal yang berdiri sendiri, tetapi hasil dari pilihan metode dan basis set.

Ketiga, mahasiswa belajar menghubungkan konsep teori dengan data tabel dan grafik. Keempat, mahasiswa belajar bahwa peningkatan kualitas perhitungan memerlukan biaya. Kelima, mahasiswa mulai memahami batas Hartree–Fock sebagai dasar menuju metode korelasi elektron dan DFT.

Bab ini juga menjadi penghubung penting menuju bab berikutnya. Setelah mahasiswa memahami Hartree–Fock dan basis set, mereka akan lebih siap mempelajari metode DFT, HOMO-LUMO, momen dipol, dan spektrum molekul. Mereka juga akan lebih kritis ketika membaca laporan komputasi yang mencantumkan metode seperti B3LYP/6-31G(d), HF/STO-3G, atau MP2/cc-pVDZ. Notasi tersebut tidak lagi dibaca sebagai kode asing, tetapi sebagai informasi metodologis yang menentukan kualitas hasil.

13. Transisi ke Dasar Teori

Subbab 6.1 telah menetapkan tujuan Praktikum 3, yaitu memahami pengaruh Hartree–Fock dan fungsi basis terhadap energi total, panjang ikatan, dan biaya komputasi. Tujuan ini akan menjadi dasar seluruh kegiatan pada Bab 6. Subbab berikutnya akan membahas dasar teori secara lebih rinci, mencakup metode medan konsisten-diri, orbital molekul, fungsi basis, energi elektronik, dan keterbatasan Hartree–Fock.

Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap membaca teori. Mereka mengetahui bahwa Hartree–Fock bukan hanya keyword dalam software, basis set bukan sekadar pilihan teknis, energi total bukan angka bebas konteks, dan waktu komputasi bukan sekadar gangguan praktis, melainkan bagian dari keputusan metodologis dalam kimia komputasi.

6.2 Dasar Teori

Dasar teori Praktikum 3 bertumpu pada hubungan antara **metode Hartree–Fock**, **fungsi basis**, **energi total molekul**, dan **biaya komputasi**. Keempat unsur ini membentuk fondasi penting dalam kimia kuantum komputasi. Mahasiswa tidak cukup hanya mengetahui bahwa Hartree–Fock adalah salah satu metode *ab initio*, tetapi perlu memahami bagaimana metode ini membangun orbital molekul, bagaimana fungsi basis merepresentasikan orbital tersebut, bagaimana energi elektronik dihitung, dan mengapa keterbatasan Hartree–Fock harus selalu diperhatikan dalam interpretasi hasil.

Dalam praktik komputasi, perhitungan Hartree–Fock hampir selalu ditulis dalam bentuk gabungan metode dan basis set, misalnya:

```
HF/STO-3G
HF/3-21G
HF/6-31G
HF/6-31G(d)
HF/cc-pVDZ
```


Notasi tersebut berarti metode yang digunakan adalah Hartree–Fock, sedangkan bagian setelah garis miring menunjukkan basis set. Dengan demikian, HF/STO-3G dan HF/6-31G(d) bukan perhitungan yang identik. Keduanya sama-sama menggunakan pendekatan Hartree–Fock, tetapi memakai ruang fungsi basis yang berbeda. Akibatnya, energi total, panjang ikatan, distribusi elektron, dan waktu komputasi dapat berbeda.

Secara historis, Hartree–Fock berkembang dari upaya awal menyelesaikan persoalan atom dan molekul banyak elektron dalam mekanika kuantum. Persamaan Schrödinger dapat ditulis secara formal, tetapi untuk sistem banyak elektron tidak dapat diselesaikan secara eksak dengan mudah. Douglas Hartree memperkenalkan pendekatan medan konsisten-diri, Vladimir Fock memperbaiki pendekatan tersebut dengan memasukkan prinsip antisimetri fungsi gelombang melalui determinan Slater, dan Roothaan kemudian merumuskan persamaan Hartree–Fock dalam bentuk matriks berbasis kombinasi linear fungsi basis. Rumusan Roothaan–Hall inilah yang membuat metode Hartree–Fock dapat dijalankan secara sistematis dengan komputer modern, sebagaimana dijelaskan dalam literatur standar kimia kuantum seperti Szabo dan Ostlund, Levine, Jensen, serta Cramer.

1. Masalah Banyak Elektron dalam Molekul

Molekul terdiri atas inti atom dan elektron. Dalam kerangka mekanika kuantum, perilaku elektron dalam molekul dijelaskan oleh persamaan Schrödinger. Untuk sistem molekul, persamaan tersebut secara umum sangat kompleks karena setiap elektron berinteraksi dengan inti dan juga dengan elektron lain. Interaksi elektron-elektron inilah yang membuat persoalan banyak elektron sulit.

Dengan aproksimasi Born–Oppenheimer, posisi inti dianggap tetap ketika energi elektronik dihitung. Dengan demikian, gerak elektron dapat dipelajari pada konfigurasi inti tertentu. Dalam satuan atom, Hamiltonian elektronik molekul secara konseptual dapat ditulis sebagai:

$$\hat{H}_{el} = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \sum_A \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}$$

dengan:

Simbol	Makna
$-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2$	Energi kinetik elektron
$-\sum_i \sum_A \frac{Z_A}{r_{iA}}$	Tarikan elektron terhadap inti
$+\sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}$	Tolakan antarelektron

Energi tolakan antarinti biasanya ditambahkan sebagai bagian dari energi total molekul pada geometri tertentu:

$$E_{total} = E_{elektronik} + E_{tolakan\_inti}$$

Persoalan muncul karena suku tolakan antarelektro $1/r_{ij}$ membuat gerak setiap elektron bergantung langsung pada posisi elektron lain. Jika ada banyak elektron, penyelesaian eksak menjadi sangat sulit. Hartree–Fock hadir sebagai pendekatan untuk menangani persoalan ini melalui konsep medan rata-rata.

2. Gagasan Dasar Hartree–Fock

Hartree–Fock adalah metode yang mendekati fungsi gelombang banyak elektron dengan satu determinan Slater. Determinan Slater diperlukan karena elektron adalah fermion, sehingga fungsi gelombang total harus antisimetri terhadap pertukaran dua elektron. Prinsip antisimetri ini merupakan konsekuensi dari prinsip Pauli: dua elektron tidak boleh memiliki keadaan kuantum yang sama secara lengkap.

Dalam Hartree–Fock, setiap elektron tidak diperlakukan sebagai partikel yang bebas dari elektron lain. Namun, interaksi antarelektro tidak dihitung sebagai korelasi gerak sesaat antar elektron secara lengkap. Sebagai gantinya, setiap elektron dianggap bergerak dalam **medan efektif rata-rata** yang dibentuk oleh semua elektron lain. Inilah inti dari pendekatan medan rata-rata.

Secara sederhana:

elektron nyata dalam molekul
→ saling tolak-menolak secara langsung dan dinamis

pendekatan Hartree–Fock
→ setiap elektron bergerak dalam medan rata-rata elektron lain

Dengan pendekatan ini, persoalan banyak elektron diubah menjadi kumpulan persoalan satu elektron efektif. Setiap elektron menempati orbital molekul, dan orbital tersebut dihitung secara iteratif sampai konsisten dengan medan elektron yang dihasilkannya.

Hartree–Fock penting bukan hanya karena masih digunakan, tetapi karena menjadi dasar konseptual bagi banyak metode lain. Metode pasca-Hartree–Fock seperti MP2, configuration interaction, coupled cluster, dan beberapa pendekatan lain berangkat dari kerangka orbital Hartree–Fock. DFT juga sering dibandingkan dengan Hartree–Fock, terutama dalam pembahasan exchange, korelasi, dan orbital molekul.

3. Metode Medan Konsisten-Diri atau Self-Consistent Field

Metode Hartree–Fock diselesaikan melalui prosedur **self-consistent field** atau SCF. Istilah ini berarti medan yang digunakan untuk menghitung orbital harus konsisten dengan distribusi elektron yang dihasilkan oleh orbital tersebut.

Prosedur SCF dapat dipahami sebagai proses iteratif:

```

tebakan awal orbital
→ hitung distribusi elektron
→ bangun operator Fock
→ selesaikan persamaan orbital baru
→ perbarui distribusi elektron
→ ulangi sampai konsisten

```

Pada awal perhitungan, software membuat tebakan awal orbital molekul. Tebakan ini dapat berasal dari orbital atom, extended Hückel, superposisi densitas atom, atau metode internal software. Dari tebakan orbital tersebut, software menghitung distribusi elektron. Distribusi elektron digunakan untuk membangun operator Fock. Operator Fock kemudian digunakan untuk menghitung orbital baru. Orbital baru menghasilkan distribusi elektron baru. Proses ini diulang sampai perubahan energi atau densitas elektron antar iterasi menjadi sangat kecil.

Secara ringkas, konvergensi SCF berarti:

```

orbital yang digunakan untuk membangun medan
≈ orbital yang dihasilkan dari medan tersebut

```

Jika kondisi ini tercapai, perhitungan dikatakan self-consistent. Jika tidak tercapai, perhitungan SCF gagal konvergen. Dalam praktikum, kegagalan SCF harus dibedakan dari kegagalan optimasi geometri. Pada single point energy, SCF adalah proses utama. Pada optimasi geometri, SCF dijalankan berulang pada banyak geometri yang berbeda.

SCF menjadi konsep penting karena mahasiswa akan melihat output seperti:

```

SCF converged
SCF energy
maximum iterations exceeded
density convergence
energy convergence

```

Istilah-istilah tersebut harus dibaca secara bermakna. Jika SCF belum konvergen, energi total tidak boleh langsung dianggap valid.

4. Operator Fock, Coulomb, dan Exchange

Dalam Hartree–Fock, setiap elektron bergerak dalam operator efektif yang disebut **operator Fock**. Secara konseptual, operator Fock mencakup energi kinetik elektron, tarikan elektron terhadap inti, tolakan Coulomb rata-rata dari elektron lain, dan efek exchange akibat antisimetri fungsi gelombang.

Secara simbolik:

$$f(i) = h(i) + \sum_j [J_j(i) - K_j(i)]$$

dengan:

Simbol	Makna
$f(i)$	Operator Fock untuk elektron ke-i
$h(i)$	Operator satu-elektron: energi kinetik dan tarikan inti
$J_j(i)$	Operator Coulomb, tolakan rata-rata dari elektron lain
$K_j(i)$	Operator exchange, akibat antisimetri fungsi gelombang

Suku Coulomb menggambarkan tolakan elektrostatis rata-rata antara elektron. Suku exchange tidak memiliki padanan klasik sederhana. Exchange muncul karena fungsi gelombang banyak elektron harus antisimetri terhadap pertukaran elektron. Efek exchange membuat elektron dengan spin sama cenderung menghindari satu sama lain secara kuantum.

Hartree–Fock menangani exchange secara tepat dalam batas satu determinan Slater. Namun, Hartree–Fock belum menangani korelasi elektron dinamis secara lengkap. Inilah salah satu keterbatasan terpenting metode ini.

5. Orbital Molekul dalam Hartree–Fock

Orbital molekul adalah fungsi matematika yang menggambarkan keadaan satu elektron dalam molekul. Dalam Hartree–Fock, elektron mengisi orbital molekul sesuai prinsip Aufbau, prinsip Pauli, dan aturan spin yang sesuai dengan keadaan elektronik sistem.

Untuk molekul tertutup seperti H_2 , HF, H_2O , dan CH_4 pada keadaan dasar, elektron biasanya berpasangan dalam orbital molekul terisi. Dalam pendekatan restricted Hartree–Fock, pasangan elektron dengan spin alfa dan beta menempati orbital spasial yang sama. Untuk sistem terbuka atau radikal, pendekatan unrestricted Hartree–Fock dapat digunakan, tetapi pembahasan tersebut belum menjadi fokus Praktikum 3.

Orbital molekul penting karena energi total Hartree–Fock diperoleh dari orbital-orbital yang telah konvergen. Selain itu, orbital molekul menjadi dasar pemahaman sifat elektronik seperti HOMO, LUMO, energi ionisasi secara pendekatan Koopmans, serta distribusi kerapatan elektron.

Namun, mahasiswa harus berhati-hati. Orbital molekul adalah alat teoritis yang bergantung pada metode dan basis set. Bentuk orbital yang divisualisasikan tidak boleh dianggap sebagai objek fisik sederhana yang berdiri sendiri tanpa konteks. Orbital membantu menafsirkan struktur elektronik, tetapi hasilnya tetap bergantung pada pendekatan komputasi.

6. Roothaan–Hall dan Fungsi Basis

Agar Hartree–Fock dapat dihitung dengan komputer, orbital molekul dinyatakan sebagai kombinasi linear fungsi basis. Jika ψ_i adalah orbital molekul, maka:

$$\psi_i = \sum_{\mu} C_{\mu i} \chi_{\mu}$$

dengan:

Simbol	Makna
ψ_i	Orbital molekul ke-i
χ_μ	Fungsi basis ke- μ
$c_{\mu i}$	Koefisien kombinasi linear
μ	Indeks fungsi basis

Dengan representasi ini, persoalan Hartree–Fock berubah menjadi persamaan matriks Roothaan–Hall:

$$FC = SC\varepsilon$$

dengan:

Simbol	Makna
F	Matriks Fock
C	Matriks koefisien orbital
S	Matriks overlap fungsi basis
ε	Matriks energi orbital

Persamaan ini memperlihatkan mengapa basis set sangat penting. Jika jumlah fungsi basis bertambah, ukuran matriks Fock dan matriks overlap juga bertambah. Matriks yang lebih besar memberi fleksibilitas lebih besar, tetapi membutuhkan biaya komputasi lebih tinggi.

Dengan demikian, basis set bukan hanya daftar teknis dalam input. Basis set menentukan ruang matematika tempat orbital molekul dibangun. Jika ruang ini terlalu kecil, orbital tidak dapat menyesuaikan bentuk distribusi elektron dengan baik. Jika ruang lebih besar, hasil dapat membaik, tetapi waktu komputasi meningkat.

7. Jenis-Jenis Fungsi Basis

Dalam kimia kuantum, fungsi basis sering dibangun dari dua gagasan utama: **Slater-type orbitals** dan **Gaussian-type orbitals**.

Slater-type orbitals atau STO memiliki bentuk radial yang lebih mirip orbital atom hidrogenik, terutama dalam perilaku dekat inti dan peluruhan eksponensial. Namun, integral dua elektron dengan STO lebih sulit dihitung secara efisien untuk molekul besar.

Gaussian-type orbitals atau GTO lebih mudah digunakan secara komputasi karena produk dua fungsi Gaussian dapat ditangani secara matematis dengan lebih efisien. Kekurangannya, satu

Gaussian tunggal tidak meniru orbital atom sebaik STO. Oleh karena itu, beberapa Gaussian sering dikombinasikan untuk mendekati bentuk orbital Slater.

Inilah latar munculnya basis seperti STO-3G. Dalam STO-3G, satu fungsi tipe Slater didekati oleh kombinasi tiga Gaussian. Basis ini kecil dan cepat, tetapi fleksibilitasnya terbatas. Basis set lain seperti 3-21G, 6-31G, 6-31G(d), dan cc-pVDZ memberi fleksibilitas lebih besar.

Jenis basis set yang umum dalam praktikum dapat dipahami sebagai berikut:

Jenis Basis	Ciri Umum	Contoh
Minimal basis	Satu fungsi basis untuk setiap orbital atom terisi utama	STO-3G
Split-valence basis	Elektron valensi diberi lebih dari satu fungsi	3-21G, 6-31G
Polarization basis	Menambah fungsi dengan momentum sudut lebih tinggi	6-31G(d), 6-31G(d,p)
Diffuse basis	Menambah fungsi menyebar untuk elektron jauh dari inti	6-31+G(d), aug-cc-pVDZ
Correlation-consistent basis	Dirancang untuk konvergensi sistematis energi korelasi	cc-pVDZ, cc-pVTZ

Dalam Praktikum 3, mahasiswa tidak harus menggunakan semua jenis basis tersebut. Namun, mereka perlu memahami prinsipnya: basis set yang lebih besar memberi ruang lebih fleksibel bagi orbital molekul.

8. Basis Set Minimal, Split-Valence, Polarisasi, dan Difus

Basis set minimal seperti STO-3G hanya menyediakan representasi paling sederhana bagi orbital atom yang diperlukan. Basis ini sangat cepat, tetapi kurang fleksibel. Untuk pembelajaran awal, STO-3G berguna karena memungkinkan perhitungan cepat dan memperlihatkan prinsip dasar.

Basis set split-valence seperti 3-21G atau 6-31G memberikan perlakuan lebih fleksibel pada elektron valensi. Elektron valensi sangat penting dalam ikatan kimia, sehingga fleksibilitas tambahan pada valensi dapat memperbaiki deskripsi ikatan.

Fungsi polarisasi, misalnya (d) pada 6-31G(d), menambahkan fungsi dengan momentum sudut lebih tinggi. Fungsi ini memungkinkan distribusi elektron “membengkok” atau terpolarisasi ketika membentuk ikatan. Untuk atom berat periode kedua seperti C, N, O, dan F, fungsi d dapat membantu menggambarkan distorsi elektron dalam lingkungan molekul. Untuk hidrogen, fungsi p dapat ditambahkan dalam basis seperti 6-31G(d,p).

Fungsi difus, ditandai dengan tanda + atau aug, penting untuk sistem yang elektronnya menyebar jauh dari inti, seperti anion, keadaan tereksitasi, interaksi lemah, dan molekul sangat polar. Dalam Praktikum 3, fungsi difus belum menjadi fokus utama, tetapi mahasiswa perlu mengetahui perannya.

Contoh interpretasi:

HF/STO-3G cepat, tetapi representasi orbital terbatas.

HF/6-31G lebih fleksibel pada elektron valensi.

HF/6-31G(d) menambahkan fungsi polarisasi sehingga geometri dan energi dapat membaik.

HF/aug-cc-pVDZ lebih fleksibel untuk sistem dengan kerapatan elektron menyebar, tetapi lebih mahal.

9. Energi Elektronik dan Energi Total dalam Hartree–Fock

Energi Hartree–Fock diperoleh setelah orbital molekul mencapai konvergensi SCF. Energi ini mencakup kontribusi dari energi satu-elektron dan interaksi dua-elektron dalam pendekatan medan rata-rata.

Secara konseptual:

```
E_HF = energi kinetik elektron
      + energi tarikan elektron-inti
      + energi tolakan elektron-elektron rata-rata
      + energi exchange
      + energi tolakan inti
```

Dalam output software, mahasiswa biasanya menemukan nilai seperti:

```
FINAL RHF ENERGY IS ...
SCF ENERGY = ...
TOTAL ENERGY = ...
```

Istilah yang digunakan dapat berbeda antarsoftware. Yang penting, mahasiswa harus mencatat energi total akhir beserta satuannya, biasanya Hartree. Selain itu, mahasiswa harus mencatat basis set, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi.

Dalam Praktikum 3, energi total digunakan untuk membandingkan basis set pada molekul yang sama. Jika H₂O dihitung dengan beberapa basis set, mahasiswa dapat melihat bagaimana energi berubah ketika basis set diperbesar. Biasanya energi menjadi lebih rendah dan mendekati nilai batas basis set tertentu. Namun, perubahan energi makin kecil ketika basis set semakin besar. Hal ini menjadi dasar pembahasan konvergensi basis set.

10. Prinsip Variasional dan Energi Hartree–Fock

Salah satu landasan penting Hartree–Fock adalah prinsip variasional. Prinsip ini menyatakan bahwa energi yang dihitung dari fungsi gelombang trial tidak akan lebih rendah daripada energi eksak keadaan dasar dalam Hamiltonian yang sama. Dalam konteks basis set, jika ruang fungsi basis diperbesar, fungsi gelombang trial memiliki lebih banyak fleksibilitas untuk mendekati fungsi gelombang terbaik dalam kerangka metode tersebut.

Secara praktis, mahasiswa sering melihat pola:

basis kecil → energi lebih tinggi
 basis lebih besar → energi lebih rendah
 basis makin besar → energi mendekati batas tertentu

Namun, perlu ditegaskan bahwa energi yang lebih rendah akibat basis set lebih besar tidak berarti metode Hartree–Fock menjadi eksak. Jika basis set dibuat sangat besar, Hartree–Fock mendekati **Hartree–Fock limit**, bukan energi eksak penuh. Selisih antara energi eksak nonrelativistik dalam aproksimasi Born–Oppenheimer dan energi Hartree–Fock limit disebut energi korelasi.

Secara konseptual:

$$E_{\text{korelasi}} = E_{\text{eksak}} - E_{\text{HF}}$$

Karena energi eksak lebih rendah daripada energi Hartree–Fock, energi korelasi biasanya bernilai negatif. Hartree–Fock tidak menangkap korelasi elektron dinamis secara lengkap. Karena itu, memperbesar basis set tidak menghilangkan seluruh kesalahan Hartree–Fock.

11. Keterbatasan Hartree–Fock

Hartree–Fock memiliki kedudukan penting, tetapi juga memiliki keterbatasan mendasar.

Pertama, Hartree–Fock menggunakan satu determinan Slater. Untuk banyak sistem, terutama keadaan dasar molekul tertutup sederhana, pendekatan ini cukup baik sebagai titik awal. Namun, untuk sistem dengan korelasi kuat, pemutusan ikatan, keadaan tereksitasi, atau radikal tertentu, satu determinan dapat menjadi kurang memadai.

Kedua, Hartree–Fock belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Elektron dalam kenyataan saling menghindari secara dinamis karena tolakan Coulomb. Hartree–Fock memperlakukan tolakan elektron melalui medan rata-rata dan exchange, tetapi belum menangkap seluruh gerak saling menghindari elektron dengan spin berlawanan.

Ketiga, Hartree–Fock sangat bergantung pada basis set. Basis kecil dapat menghasilkan energi dan geometri yang kurang baik. Basis lebih besar memperbaiki representasi orbital, tetapi meningkatkan biaya komputasi.

Keempat, Hartree–Fock dapat mengalami masalah konvergensi SCF, terutama pada sistem yang sulit, geometri buruk, atau keadaan elektronik yang hampir degenerat. Pada molekul sederhana dalam Praktikum 3, masalah ini biasanya tidak dominan, tetapi tetap perlu diketahui.

Kelima, Hartree–Fock sering kurang baik untuk energi ikatan, energi reaksi, interaksi lemah, dan sifat yang sangat dipengaruhi korelasi elektron. Karena itu, metode pasca-Hartree–Fock dan DFT dikembangkan untuk memperbaiki keterbatasan tersebut.

Dengan memahami keterbatasan ini, mahasiswa tidak akan membuat klaim berlebihan. Praktikum 3 tidak bertujuan membuktikan bahwa Hartree–Fock adalah metode terbaik, melainkan menjadikan Hartree–Fock sebagai titik awal untuk memahami struktur elektronik dan basis set.

12. Restricted dan Unrestricted Hartree–Fock

Dalam praktik, terdapat beberapa bentuk Hartree–Fock. Dua yang paling sering dibahas adalah **Restricted Hartree–Fock** dan **Unrestricted Hartree–Fock**.

Restricted Hartree–Fock atau RHF digunakan untuk sistem tertutup, yaitu sistem yang elektronnya berpasangan. Dalam RHF, elektron spin alfa dan spin beta dalam satu pasangan menempati orbital spasial yang sama. Molekul seperti H_2 , HF, H_2O , dan CH_4 pada keadaan dasar umumnya dapat diperlakukan dengan RHF.

Unrestricted Hartree–Fock atau UHF digunakan untuk sistem terbuka, misalnya radikal atau spesies dengan elektron tidak berpasangan. Dalam UHF, orbital untuk elektron alfa dan beta dapat berbeda. UHF lebih fleksibel untuk sistem terbuka, tetapi dapat mengalami spin contamination, yaitu keadaan spin hasil perhitungan tidak murni sesuai spin yang diinginkan.

Dalam Praktikum 3, molekul model yang dipilih umumnya tertutup dan netral, sehingga pendekatan RHF lebih sesuai untuk pembelajaran dasar. Mahasiswa cukup memahami bahwa jenis Hartree–Fock harus disesuaikan dengan keadaan spin sistem.

13. Single Point Energy dan Optimasi Geometri dalam Kerangka Hartree–Fock

Dalam Bab 6, Hartree–Fock digunakan untuk dua jenis perhitungan: **single point energy** dan **optimasi geometri**.

Single point energy menghitung energi pada geometri tertentu tanpa mengubah koordinat atom. Perhitungan ini cocok untuk membandingkan energi beberapa basis set pada struktur yang sama. Dengan cara ini, pengaruh basis set terhadap energi dapat dilihat tanpa bercampur dengan perubahan geometri.

Optimasi geometri menghitung energi dan gradien untuk memperbarui posisi atom sampai struktur konvergen. Perhitungan ini cocok untuk melihat pengaruh basis set terhadap panjang ikatan dan sudut ikatan. Jika basis set berbeda digunakan untuk optimasi, hasil geometri dapat berubah.

Perbedaannya:

Jenis Perhitungan	Pertanyaan yang Dijawab
Single point energy	Bagaimana energi berubah jika basis set diubah pada geometri yang sama?
Optimasi geometri	Bagaimana geometri optimum berubah jika basis set diubah?

Keduanya penting. Single point energy menekankan energi elektronik, sedangkan optimasi geometri menekankan struktur kesetimbangan.

14. Jumlah Fungsi Basis dan Biaya Komputasi

Jumlah fungsi basis menentukan ukuran matriks dalam perhitungan Hartree–Fock. Jika jumlah fungsi basis meningkat, ukuran matriks Fock, matriks overlap, dan integral dua-elektron juga meningkat. Akibatnya, waktu komputasi bertambah.

Secara sederhana:

basis set kecil
 → jumlah fungsi basis sedikit
 → matriks kecil
 → waktu komputasi singkat
 → energi kurang fleksibel

basis set besar
 → jumlah fungsi basis banyak
 → matriks besar
 → waktu komputasi lebih lama
 → energi lebih fleksibel

Namun, peningkatan basis set tidak selalu menghasilkan perbaikan yang sebanding dengan biaya tambahan. Misalnya, perubahan energi dari STO-3G ke 6-31G mungkin cukup besar, tetapi perubahan dari 6-31G(d) ke basis lebih besar mungkin lebih kecil dibandingkan peningkatan waktunya. Inilah yang disebut kompromi antara akurasi dan efisiensi.

Dalam Praktikum 3, mahasiswa diminta mencatat jumlah fungsi basis dan waktu komputasi agar dapat melihat hubungan ini secara empiris. Mereka tidak hanya membaca teori, tetapi mengamati langsung dari data.

15. Konvergensi Basis Set Sederhana

Konvergensi basis set berarti hasil perhitungan mendekati nilai batas ketika ukuran basis set diperbesar. Dalam praktik dasar, mahasiswa dapat melihat konvergensi secara sederhana melalui grafik energi total terhadap basis set.

Contoh pola yang diharapkan:

STO-3G	→ energi relatif tinggi
3-21G	→ energi lebih rendah
6-31G	→ energi lebih rendah lagi
6-31G(d)	→ energi lebih rendah atau lebih stabil
cc-pVDZ	→ mendekati hasil lebih baik

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa grafik tersebut bukan selalu garis lurus. Basis set berbeda tidak selalu membentuk urutan sederhana jika jenis basisnya berbeda. Karena itu, analisis harus dilakukan hati-hati. Lebih baik membahas pola umum daripada membuat klaim mutlak.

Konvergensi basis set sederhana dalam praktikum dapat dianalisis melalui selisih energi antar basis:

$$\Delta E = E_{\text{basis\_besar}} - E_{\text{basis\_kecil}}$$

Jika selisih energi makin kecil ketika basis diperbesar, berarti hasil mulai mendekati konvergensi basis set dalam konteks praktikum tersebut.

16. Contoh Konseptual pada Molekul Model

Pada H_2 , basis set lebih besar dapat memperbaiki representasi orbital ikatan H–H. Karena molekul ini sangat sederhana, ia cocok untuk memperlihatkan prinsip dasar bahwa energi berubah ketika basis set berubah.

Pada LiH, ikatan bersifat lebih polar dibanding H_2 . Perbedaan elektronegativitas antara Li dan H membuat distribusi elektron tidak simetris. Basis set yang lebih fleksibel dapat membantu menggambarkan polaritas ikatan.

Pada HF, ikatan H–F sangat polar. Atom F memiliki elektron lebih banyak dan sangat elektronegatif. Basis set yang terlalu kecil dapat kurang fleksibel dalam menggambarkan distribusi elektron di sekitar F.

Pada H_2O , basis set memengaruhi energi total, panjang O–H, dan sudut H–O–H. Fungsi polarisasi dapat membantu menggambarkan pasangan elektron bebas dan bentuk bengkok molekul.

Pada CH_4 , basis set memengaruhi energi total dan panjang C–H. Karena CH_4 memiliki simetri tinggi, kesetaraan panjang C–H dan sudut H–C–H dapat menjadi indikator kewajaran hasil optimasi.

Contoh-contoh ini menunjukkan bahwa basis set bukan hanya memengaruhi angka energi, tetapi juga kualitas deskripsi ikatan kimia.

17. Analisis Kritis terhadap Energi Lebih Rendah

Mahasiswa sering menyimpulkan bahwa energi lebih rendah berarti hasil pasti lebih benar. Kesimpulan ini perlu dikritisi. Dalam prinsip variasional, energi yang lebih rendah dalam metode dan Hamiltonian yang sama menunjukkan fungsi gelombang trial yang lebih baik secara energi.

Namun, dalam praktik, hasil yang lebih rendah belum tentu cukup untuk menyatakan semua sifat lebih akurat.

Ada beberapa alasan.

Pertama, energi total bukan satu-satunya parameter. Geometri, momen dipol, frekuensi vibrasi, dan energi relatif juga penting.

Kedua, basis set lebih besar dapat memperbaiki energi tetapi tidak menghilangkan keterbatasan metode Hartree–Fock.

Ketiga, perbandingan energi harus dilakukan pada molekul dan kondisi yang sama.

Keempat, energi total absolut tidak selalu langsung bermakna secara kimia jika tidak dikaitkan dengan energi relatif, perubahan energi, atau perbandingan sistem yang sesuai.

Dengan demikian, mahasiswa harus menulis analisis secara proporsional:

Basis set lebih besar menghasilkan energi total yang lebih rendah pada molekul yang sama. Hal ini menunjukkan peningkatan fleksibilitas representasi orbital. Namun, hasil tersebut tetap berada dalam kerangka Hartree–Fock dan belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap.

18. Implikasi Pedagogis Dasar Teori Hartree–Fock dan Basis Set

Dasar teori Bab 6 memiliki implikasi pedagogis yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa metode komputasi adalah model matematika, bukan mesin kebenaran mutlak. Kedua, mahasiswa memahami bahwa basis set menentukan ruang representasi orbital molekul. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa energi total harus dibaca dengan konteks metode dan basis. Keempat, mahasiswa memahami bahwa akurasi dan biaya komputasi harus dipertimbangkan bersama. Kelima, mahasiswa mulai melihat mengapa metode lanjutan seperti DFT, MP2, dan coupled cluster diperlukan.

Pemahaman ini penting untuk seluruh praktikum berikutnya. Ketika mahasiswa kelak menggunakan DFT, mereka akan memahami bahwa selain fungsional, basis set tetap penting. Ketika mahasiswa menghitung HOMO-LUMO, mereka akan memahami bahwa orbital bergantung pada metode dan basis. Ketika mahasiswa menghitung spektrum IR, mereka akan memahami bahwa geometri dan Hessian bergantung pada kualitas perhitungan struktur elektronik.

19. Transisi ke Software yang Digunakan

Subbab 6.2 telah menjelaskan dasar teori Praktikum 3: metode medan konsisten-diri, orbital molekul, fungsi basis, energi elektronik, jumlah fungsi basis, biaya komputasi, dan keterbatasan Hartree–Fock. Teori ini menjadi landasan untuk menggunakan software secara sadar.

Subbab berikutnya akan membahas software yang digunakan, yaitu ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, dan Python. Setiap software memiliki peran berbeda dalam alur praktikum. ChemCompute memudahkan akses berbasis web. GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan PySCF menjalankan perhitungan struktur elektronik. Python digunakan untuk menyusun tabel, grafik energi terhadap basis set, grafik waktu komputasi, serta analisis konvergensi basis set sederhana.

6.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 3 dipilih untuk mendukung pembelajaran tentang **Hartree–Fock, fungsi basis, energi total, panjang ikatan, dan biaya komputasi**. Pada praktikum ini, software tidak hanya diperlakukan sebagai alat eksekusi perhitungan, tetapi sebagai bagian dari ekosistem kerja ilmiah: ada software yang berfungsi sebagai platform web, ada yang menjadi mesin perhitungan struktur elektronik, ada yang terintegrasi dengan Python, dan ada pula yang digunakan untuk analisis data hasil komputasi.

Software yang digunakan dalam Bab 6 adalah:

1. **ChemCompute**
2. **GAMESS**
3. **ORCA**
4. **Gaussian**
5. **Psi4**
6. **PySCF**
7. **Python**

Ketujuh software tersebut tidak harus digunakan seluruhnya secara bersamaan oleh setiap mahasiswa. Dalam kelas dasar, jalur paling mudah adalah **ChemCompute → GAMESS → unduh output → Python untuk analisis energi dan basis set**. Untuk kelas yang lebih teknis, dosen dapat menambahkan ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF sebagai jalur pembandingan. Dengan demikian, subbab ini bertujuan menjelaskan fungsi, kedudukan, kelebihan, keterbatasan, dan peran pedagogis masing-masing software dalam Praktikum 3.

1. Prinsip Pemilihan Software dalam Praktikum Hartree–Fock dan Basis Set

Pemilihan software pada Praktikum 3 harus mengikuti tujuan praktikum, yaitu memahami pengaruh metode Hartree–Fock dan fungsi basis terhadap energi total, panjang ikatan, dan biaya komputasi. Oleh karena itu, software yang digunakan harus mampu mendukung beberapa kebutuhan utama:

1. Menjalankan perhitungan **Hartree–Fock**.
2. Menggunakan beberapa **basis set**.
3. Menjalankan **single point energy**.
4. Menjalankan **optimasi geometri**.

5. Menampilkan **energi total**.
6. Menampilkan atau memungkinkan pencatatan **jumlah fungsi basis**.
7. Menampilkan atau memungkinkan pencatatan **waktu komputasi**.
8. Menghasilkan output yang dapat dianalisis ulang dengan Python.

Dalam praktikum ini, mahasiswa tidak hanya belajar menjalankan software, tetapi belajar membaca hubungan antara **metode**, **basis set**, **energi**, dan **biaya komputasi**. Software hanyalah alat. Pemahaman ilmiah muncul ketika mahasiswa mampu menjelaskan mengapa energi HF/STO-3G berbeda dari HF/6-31G(d), mengapa basis set lebih besar memerlukan waktu lebih lama, dan mengapa Hartree–Fock tetap memiliki keterbatasan meskipun basis set diperbesar.

Dengan demikian, software pada Bab 6 harus digunakan secara kritis. Mahasiswa tidak boleh hanya menulis “hasil diperoleh dari ChemCompute” atau “hasil diperoleh dari Gaussian” tanpa menyebut metode dan basis set. Penulisan yang benar harus mencantumkan:

```
Software      : GAMESS melalui ChemCompute
Metode        : Hartree-Fock
Basis set     : 6-31G(d)
Jenis job     : Single point energy / Optimasi geometri
Molekul       : H2O
Muatan        : 0
Multiplicity  : 1
Energi total  : ... Hartree
Waktu         : ... detik
```

Informasi seperti ini penting karena energi total tidak bermakna jika dilepaskan dari konteks metode dan basis set.

2. ChemCompute sebagai Platform Web Praktikum

ChemCompute digunakan sebagai platform web untuk menjalankan perhitungan kimia komputasi tanpa mahasiswa harus menginstal software komputasi berat di komputer masing-masing. Situs ChemCompute menjelaskan bahwa platform ini ditujukan untuk computational chemistry dalam pengajaran dan riset sarjana, tanpa kerepotan kompilasi, instalasi, dan pemeliharaan software serta hardware lokal. (chemcompute.org)

Dalam Praktikum 3, ChemCompute berperan sebagai **jalur akses utama** bagi mahasiswa yang belum memiliki lingkungan komputasi lokal. Mahasiswa dapat menjalankan job Hartree–Fock melalui antarmuka web, memilih basis set, mengirim perhitungan, lalu mengunduh output. ChemCompute sangat berguna untuk kelas besar karena mengurangi hambatan teknis.

Peran ChemCompute dalam Praktikum 3 meliputi:

1. Menyediakan akses web untuk menjalankan perhitungan.
2. Memudahkan mahasiswa menggunakan GAMESS tanpa instalasi lokal.
3. Membantu pelaksanaan single point energy dan optimasi geometri.

4. Memudahkan pembelajaran variasi basis set.
5. Menghasilkan file output yang dapat dianalisis dengan Python.

Namun, ChemCompute harus dipahami sebagai **platform**, bukan metode. Metode tetap Hartree–Fock. Mesin perhitungan dapat berupa GAMESS atau software lain yang tersedia dalam platform. Basis set tetap harus dipilih secara eksplisit. Karena itu, laporan yang hanya menulis “menggunakan ChemCompute” belum lengkap.

Contoh penulisan yang tepat:

Perhitungan single point energy H_2O dilakukan melalui platform ChemCompute menggunakan GAMESS pada metode Hartree–Fock dengan basis set STO-3G, 3-21G, 6-31G, dan 6-31G(d).

Kelebihan ChemCompute adalah aksesibilitas. Keterbatasannya adalah ketergantungan pada internet, ketersediaan server, pilihan software yang tersedia pada platform, dan kebutuhan mahasiswa untuk tetap mengunduh serta mengarsipkan output secara tertib.

3. GAMESS sebagai Mesin Perhitungan Utama melalui ChemCompute

GAMESS, singkatan dari **General Atomic and Molecular Electronic Structure System**, adalah paket kimia kuantum ab initio umum. Situs resmi GAMESS menyebutnya sebagai general ab initio quantum chemistry package yang dikelola oleh Gordon Research Group di Iowa State University. ([Msg Chem Iowa State](#)) ChemCompute juga menyediakan halaman khusus GAMESS dan menjelaskan bahwa pengguna dapat mengirim job GAMESS ke server melalui platform tersebut. (chemcompute.org)

Dalam Praktikum 3, GAMESS dapat menjadi mesin perhitungan utama karena mendukung perhitungan Hartree–Fock dan penggunaan berbagai basis set. Melalui GAMESS, mahasiswa dapat menjalankan:

1. **Single point energy** untuk membandingkan energi total pada geometri yang sama.
2. **Optimasi geometri** untuk membandingkan panjang ikatan dari beberapa basis set.
3. Perhitungan dengan basis set kecil dan menengah untuk melihat perubahan energi dan biaya komputasi.
4. Analisis output energi total, jumlah basis, dan status konvergensi.

GAMESS sangat cocok untuk pembelajaran karena output-nya cukup lengkap dan memperlihatkan banyak informasi penting. Mahasiswa dapat belajar membaca bagian energi SCF, jumlah fungsi basis, geometri, dan status perhitungan. Namun, output GAMESS dapat panjang dan teknis, sehingga dosen perlu mengarahkan mahasiswa mencari bagian-bagian penting.

Informasi penting yang harus dicari mahasiswa dalam output GAMESS:

Informasi	Fungsi dalam Praktikum
Metode	Memastikan perhitungan benar-benar Hartree–Fock
Basis set	Menentukan representasi orbital yang digunakan
Jumlah fungsi basis	Menghubungkan basis set dengan biaya komputasi
Energi total SCF	Data utama untuk tabel energi
Waktu komputasi	Data untuk grafik biaya komputasi
Konvergensi SCF	Menilai validitas energi
Koordinat akhir	Digunakan jika optimasi geometri dilakukan

Secara kritis, mahasiswa harus memahami bahwa GAMESS bukan sekadar mesin angka. Output-nya harus dibaca. Energi total yang muncul dalam output hanya valid jika SCF konvergen. Jika SCF gagal, energi tidak boleh dipakai sebagai data utama tanpa catatan.

4. ORCA sebagai Alternatif Perhitungan Lokal dan Institusional

ORCA adalah paket kimia kuantum yang mendukung metode ab initio, DFT, dan semiempiris berbasis SCF-MO. Manual ORCA 6.1.1 menyebut ORCA sebagai paket ab initio, DFT, dan semiempirical SCF-MO. (orca-manual.mpi-muelheim.mpg.de) Dalam Praktikum 3, ORCA dapat digunakan sebagai jalur alternatif jika laboratorium memiliki instalasi lokal atau akses server institusi.

ORCA sangat baik untuk memperkenalkan input berbasis teks. Mahasiswa dapat menulis file input sederhana, menjalankan perhitungan dari terminal, lalu membaca output. Jalur ini lebih teknis daripada ChemCompute, tetapi sangat berguna untuk membangun kemandirian komputasi.

Contoh input konseptual ORCA untuk single point HF/STO-3G pada H₂:

```
! HF STO-3G SP

* xyz 0 1
H 0.000000 0.000000 0.000000
H 0.000000 0.000000 0.740000
*
```

Contoh input konseptual ORCA untuk optimasi geometri:

```
! HF 6-31G Opt

* xyz 0 1
H 0.000000 0.000000 0.000000
F 0.000000 0.000000 0.920000
*
```

Bagian HF menunjukkan metode. Bagian STO-3G atau 6-31G menunjukkan basis set. Kata SP berarti single point energy, sedangkan Opt berarti optimasi geometri. Baris xyz 0 1 menunjukkan koordinat Cartesian, muatan total 0, dan multiplicity 1.

Kelebihan ORCA adalah fleksibilitas, dokumentasi yang luas, dan kemampuan menjalankan berbagai metode modern. Keterbatasannya dalam kelas pemula adalah kebutuhan instalasi, penggunaan terminal, dan manajemen file input-output. Karena itu, ORCA lebih cocok sebagai jalur lanjutan atau pengayaan.

5. Gaussian sebagai Software Struktur Elektronik Komersial

Gaussian adalah salah satu program struktur elektronik komersial yang sangat dikenal dalam kimia komputasi. Situs resmi Gaussian menyebut Gaussian 16 sebagai bagian dari seri program struktur elektronik Gaussian yang digunakan oleh kimiawan, insinyur kimia, biokimiawan, fisikawan, dan ilmuwan lain. ([Gaussian](#))

Dalam Praktikum 3, Gaussian dapat digunakan jika institusi memiliki lisensi resmi. Gaussian mendukung Hartree–Fock, berbagai basis set, single point energy, optimasi geometri, dan analisis output yang lengkap. Jika dipasangkan dengan GaussView, mahasiswa dapat membangun struktur molekul, menyiapkan input, menjalankan perhitungan, dan memvisualisasikan hasil dengan lebih mudah.

Contoh input konseptual Gaussian untuk HF/6-31G pada H₂O:

```
%chk=h2o_hf_631g.chk
# HF/6-31G SP

H2O single point HF 6-31G

0 1
O 0.000000 0.000000 0.000000
H 0.758000 0.000000 0.504000
H -0.758000 0.000000 0.504000
```

Untuk optimasi geometri:

```
%chk=h2o_hf_631g_opt.chk
# HF/6-31G Opt

H2O geometry optimization HF 6-31G

0 1
O 0.000000 0.000000 0.000000
H 0.758000 0.000000 0.504000
H -0.758000 0.000000 0.504000
```

Gaussian sangat kuat untuk pembelajaran profesional, tetapi penggunaannya harus mematuhi lisensi. Mahasiswa tidak boleh menggunakan salinan ilegal. Secara akademik, kejujuran penggunaan software sama pentingnya dengan kejujuran dalam pelaporan hasil.

Secara kritis, mahasiswa juga harus memahami bahwa Gaussian bukan jaminan otomatis hasil paling benar. Seperti software lain, hasil Gaussian tetap bergantung pada metode, basis set, input, konvergensi, dan interpretasi pengguna.

6. Psi4 sebagai Software Open-Source Berbasis C++/Python

Psi4 adalah software kimia kuantum open-source. Situs resmi Psi4 menjelaskan bahwa Psi4 memiliki inti C++/Python, modular, open-source, dan mudah diperluas oleh proyek komunitas dalam ekosistem perangkat lunaknya. (psicode.org) Repositori resminya juga menjelaskan bahwa Psi4 adalah suite program ab initio quantum chemistry untuk simulasi sifat molekul, dengan komponen C++ dan driver Python yang fleksibel. ([GitHub](https://github.com/psi4))

Dalam Praktikum 3, Psi4 berguna karena menghubungkan kimia kuantum dengan Python. Mahasiswa dapat menulis input atau script untuk menjalankan perhitungan HF dengan beberapa basis set, lalu mengumpulkan energi dalam format yang mudah dianalisis. Psi4 sangat cocok untuk pembelajaran reproduibilitas karena seluruh prosedur dapat ditulis dalam file script.

Contoh konseptual penggunaan Psi4:

```
import psi4

psi4.set_memory("1 GB")
psi4.set_num_threads(2)

h2 = psi4.geometry("""
0 1
H 0.0 0.0 0.0
H 0.0 0.0 0.74
""")

energy = psi4.energy("scf/sto-3g", molecule=h2)
print("Energi HF/STO-3G:", energy)
```

Kelebihan Psi4 adalah keterbukaan, integrasi Python, dan kemudahan menyusun workflow komputasi. Keterbatasannya adalah kebutuhan instalasi dan pemahaman lingkungan Python. Untuk kelas dasar, Psi4 dapat digunakan sebagai pengayaan; untuk kelas yang lebih maju, Psi4 dapat menjadi jalur utama analisis Hartree–Fock dan basis set.

7. PySCF sebagai Kerangka Kimia Kuantum Berbasis Python

PySCF atau **Python-based Simulations of Chemistry Framework** adalah platform struktur elektronik berbasis Python. Situs resmi PySCF menjelaskan bahwa PySCF terutama berbasis Python, cepat karena menggunakan NumPy, SciPy, dan kode C/C++ khusus, bebas dan open-source, modular, serta mencakup koleksi metode struktur elektronik untuk molekul dan padatan

periodik. (pyscf.org) Artikel PySCF juga menjelaskan bahwa PySCF dirancang sebagai platform electronic structure umum dengan penekanan pada kesederhanaan kode, fleksibilitas workflow, dan dukungan metode mean-field maupun post-mean-field dengan basis Gaussian standar. ([arXiv](https://arxiv.org/abs/1603.02923))

Dalam Praktikum 3, PySCF sangat relevan karena mahasiswa dapat menjalankan Hartree–Fock dan basis set langsung dari Python. Ini membuat PySCF menjadi jembatan kuat antara perhitungan kimia kuantum dan analisis data. Mahasiswa dapat membuat loop basis set, menjalankan HF, mencatat energi, menghitung waktu komputasi, lalu menyusun tabel secara otomatis.

Contoh konseptual PySCF untuk H_2 :

```
from pyscf import gto, scf

mol = gto.M(
    atom="""
    H 0.0 0.0 0.0
    H 0.0 0.0 0.74
    """,
    basis="sto-3g",
    charge=0,
    spin=0
)

mf = scf.RHF(mol)
energi = mf.kernel()

print("Energi HF/STO-3G:", energi)
print("Jumlah fungsi basis:", mol.nao_nr())
```

PySCF memungkinkan mahasiswa melihat secara langsung hubungan antara basis set, jumlah fungsi basis, dan energi total. Dengan sedikit modifikasi, kode dapat menjalankan beberapa basis set:

```
basis_list = ["sto-3g", "3-21g", "6-31g", "6-31g(d)"]

for basis in basis_list:
    mol = gto.M(atom="H 0 0 0; H 0 0 0.74", basis=basis)
    mf = scf.RHF(mol)
    e = mf.kernel()
    print(basis, mol.nao_nr(), e)
```

Kelebihan PySCF adalah transparansi dan fleksibilitas. Mahasiswa dapat melihat prosedur komputasi sebagai kode yang dapat diulang. Keterbatasannya adalah kebutuhan pemahaman Python dan instalasi paket. Untuk mahasiswa yang belum terbiasa dengan Python, PySCF mungkin terasa lebih teknis daripada ChemCompute.

8. Python sebagai Alat Analisis Data Praktikum

Python digunakan sebagai alat analisis data hasil praktikum. Python sendiri adalah bahasa pemrograman dengan dokumentasi resmi yang luas dan digunakan untuk berbagai kebutuhan pemrograman. ([Python.org](https://python.org)) Dalam Praktikum 3, Python tidak hanya digunakan untuk menjalankan PySCF atau Psi4, tetapi juga untuk menganalisis output dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, atau Gaussian.

Python digunakan untuk:

1. Memasukkan data energi dari beberapa basis set.
2. Menyusun tabel metode, basis set, jumlah fungsi basis, energi total, dan waktu komputasi.
3. Membuat grafik energi terhadap ukuran basis set.
4. Membuat grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set.
5. Menghitung selisih energi antar basis set.
6. Menganalisis konvergensi basis set sederhana.
7. Menyimpan hasil analisis dalam file CSV.

Dalam workflow Python, pustaka seperti pandas dan Matplotlib sangat berguna. Pandas adalah pustaka open-source untuk analisis dan manipulasi data dalam Python, sedangkan Matplotlib adalah pustaka visualisasi untuk membuat grafik statis, animasi, dan interaktif. (pandas.pydata.org)

Contoh alur Python dalam Praktikum 3:

```
data energi dari output software
→ dimasukkan ke tabel Python
→ dihitung selisih energi
→ dibuat grafik energi vs basis set
→ dibuat grafik waktu vs basis set
→ disimpan sebagai CSV dan PNG
```

Python sangat penting karena praktikum ini menghasilkan banyak data. Jika mahasiswa menghitung H_2 , LiH, HF, H_2O , dan CH_4 dengan beberapa basis set, jumlah baris data dapat bertambah cepat. Analisis manual rawan salah. Python membantu membuat analisis lebih rapi, konsisten, dan dapat diulang.

9. Perbandingan Peran Software

Peran setiap software dalam Praktikum 3 dapat diringkas sebagai berikut:

Software	Peran Utama	Kelebihan	Keterbatasan
ChemCompute	Platform web untuk menjalankan perhitungan	Mudah diakses, cocok untuk kelas besar	Bergantung internet dan ketersediaan layanan

GAMESS	Mesin perhitungan struktur elektronik	Cocok untuk HF dan basis set melalui ChemCompute	Output teknis dan perlu diarahkan
ORCA	Alternatif perhitungan lokal/server	Fleksibel dan kuat	Perlu instalasi dan terminal
Gaussian	Software komersial struktur elektronik	Banyak digunakan dan dokumentasi matang	Memerlukan lisensi resmi
Psi4	Open-source C++/Python	Reproduktibel dan terintegrasi Python	Perlu instalasi dan kesiapan teknis
PySCF	Kerangka electronic structure berbasis Python	Sangat fleksibel untuk loop basis set	Perlu kemampuan Python
Python	Analisis tabel dan grafik	Transparan, otomatis, reproduktibel	Tidak menggantikan validasi output kimia kuantum

Tabel ini menunjukkan bahwa tidak ada satu software yang selalu paling tepat untuk semua situasi. ChemCompute cocok untuk akses mudah. GAMESS cocok sebagai mesin perhitungan melalui platform web. ORCA dan Gaussian cocok untuk jalur profesional berbasis input file. Psi4 dan PySCF cocok untuk workflow berbasis Python. Python sendiri diperlukan untuk analisis data dan visualisasi.

10. Alur Kerja Praktikum yang Direkomendasikan

Untuk kelas dasar, alur kerja yang disarankan adalah:

ChemCompute/GAMESS

- menjalankan HF dengan beberapa basis set
- mengunduh output
- mencatat energi total, jumlah fungsi basis, dan waktu
- Python
- menyusun tabel dan grafik
- laporan

Untuk kelas menengah atau lanjutan, alur dapat diperluas menjadi:

GAMESS / ORCA / Gaussian / Psi4 / PySCF

- menjalankan single point energy dan optimasi geometri
- membandingkan basis set
- Python
- analisis energi, waktu, dan konvergensi basis set
- laporan

Untuk jalur yang sangat terintegrasi dengan Python:

PySCF atau Psi4

- loop beberapa basis set
- catat energi dan jumlah fungsi basis otomatis

→ pandas
 → Matplotlib
 → CSV dan grafik

Alur-alur tersebut dapat dipilih sesuai kondisi kelas. Jika mahasiswa baru pertama kali belajar kimia komputasi, ChemCompute/GAMESS lebih aman. Jika mahasiswa sudah terbiasa terminal, ORCA atau Gaussian dapat digunakan. Jika mahasiswa sudah kuat dalam Python, PySCF atau Psi4 menjadi pilihan sangat baik.

11. Standar Informasi Software yang Harus Dicatat

Setiap perhitungan dalam Praktikum 3 harus mencatat informasi berikut:

1. Nama software.
2. Versi software jika tersedia.
3. Platform eksekusi, misalnya ChemCompute, komputer lokal, atau server kampus.
4. Metode, yaitu Hartree–Fock.
5. Basis set.
6. Molekul.
7. Muatan.
8. Multiplicity.
9. Jenis job, yaitu single point energy atau optimasi geometri.
10. Energi total.
11. Jumlah fungsi basis.
12. Waktu komputasi.
13. Status konvergensi SCF.
14. File input dan output.

Contoh metadata:

```
Molekul           : HF
Software          : GAMESS
Platform         : ChemCompute
Metode           : Hartree-Fock
Basis set        : 6-31G(d)
Jenis job        : Single point energy
Muatan           : 0
Multiplicity     : 1
Energi total     : ... Hartree
Jumlah fungsi basis : ...
Waktu komputasi  : ... detik
Status SCF       : Konvergen
File output      : hf_hf_631gd.out
```

Metadata seperti ini penting karena hasil energi tanpa identitas perhitungan tidak dapat dievaluasi. Dua energi yang sama-sama berasal dari Hartree–Fock dapat berbeda jika basis set berbeda. Dua

energi dari basis set sama dapat berbeda jika geometri berbeda. Dua waktu komputasi dapat berbeda jika hardware atau platform berbeda.

12. Analisis Kritis terhadap Penggunaan Banyak Software

Penggunaan banyak software memiliki kelebihan dan risiko. Kelebihannya, mahasiswa memperoleh gambaran nyata tentang ekosistem kimia komputasi. Mereka memahami bahwa perhitungan struktur elektronik tidak hanya dapat dilakukan dengan satu program. Mereka belajar bahwa metode Hartree–Fock tersedia di banyak software, tetapi format input, output, dan workflow dapat berbeda.

Risikonya adalah mahasiswa dapat bingung jika peran software tidak dipetakan dengan jelas. Mereka mungkin mengira ChemCompute adalah metode, padahal ChemCompute adalah platform. Mereka mungkin mengira GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan PySCF pasti menghasilkan angka sama persis, padahal perbedaan kecil dapat muncul akibat default program, konvergensi, integral, orientasi molekul, atau format output. Mereka juga mungkin mengira Python dapat menggantikan pembacaan output, padahal Python hanya menganalisis data yang dimasukkan.

Oleh karena itu, dosen perlu menekankan pembagian peran berikut:

```
ChemCompute = platform web
GAMESS/ORCA/Gaussian/Psi4/PySCF = mesin perhitungan struktur elektronik
Python = analisis data, tabel, grafik, dan CSV
```

Dengan pembagian peran tersebut, mahasiswa dapat menggunakan software secara sadar.

13. Etika, Lisensi, dan Reprodusibilitas

Praktikum kimia komputasi harus memperhatikan etika penggunaan software. Software open-source seperti Psi4 dan PySCF dapat digunakan sesuai lisensinya. ORCA memiliki ketentuan lisensi tersendiri. Gaussian adalah software komersial yang memerlukan lisensi resmi. ChemCompute digunakan sesuai aturan platform. Mahasiswa tidak boleh menggunakan software bajakan atau melanggar lisensi institusi.

Etika juga mencakup pelaporan hasil. Mahasiswa harus menulis software yang benar-benar digunakan. Jika hasil diperoleh dari GAMESS melalui ChemCompute, jangan menulis Gaussian. Jika analisis dilakukan dengan PySCF, jangan menyatakan bahwa data diperoleh dari ORCA. Kejujuran metodologis merupakan bagian dari integritas akademik.

Reprodusibilitas juga harus dijaga. File input, file output, kode Python, CSV, dan grafik harus disimpan. Jika hasil dimasukkan ke laporan, pembaca harus dapat menelusuri dari mana data berasal. Tanpa arsip file, praktikum kehilangan jejak ilmiah.

14. Implikasi Pedagogis Software dalam Bab 6

Pemilihan software dalam Bab 6 memiliki implikasi pedagogis penting. ChemCompute membantu akses. GAMESS memperkenalkan output struktur elektronik klasik. ORCA dan Gaussian memperkenalkan input file profesional. Psi4 dan PySCF memperkenalkan integrasi kimia kuantum dengan Python. Python melatih mahasiswa menganalisis data komputasi secara mandiri.

Dengan kombinasi tersebut, mahasiswa belajar bahwa kimia komputasi bukan hanya persoalan menjalankan satu software, tetapi membangun workflow ilmiah. Mereka belajar menyiapkan input, memilih metode, memilih basis set, menjalankan job, membaca output, mencatat energi, mencatat waktu, menyusun tabel, membuat grafik, dan menarik kesimpulan.

Pembelajaran ini penting karena pada tingkat riset, kemampuan membaca dan mengelola workflow sering kali sama pentingnya dengan kemampuan memahami teori. Mahasiswa yang terbiasa mencatat metode, basis set, jumlah fungsi basis, energi, waktu, dan konvergensi akan lebih siap melakukan penelitian komputasi yang tertib.

15. Transisi ke Molekul Model

Subbab 6.3 telah menjelaskan software yang digunakan dalam Praktikum 3: ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, dan Python. Setiap software memiliki fungsi tertentu dalam alur praktikum, mulai dari eksekusi perhitungan Hartree–Fock sampai analisis energi dan waktu komputasi.

Subbab berikutnya akan membahas molekul model yang digunakan, yaitu H_2 , LiH , HF , H_2O , dan CH_4 . Molekul-molekul tersebut dipilih untuk memperlihatkan pengaruh basis set pada sistem yang sederhana tetapi berbeda karakter: ikatan kovalen nonpolar, ikatan polar, molekul bengkok, dan molekul tetrahedral. Dengan memahami software pada subbab ini, mahasiswa akan lebih siap menjalankan perhitungan pada molekul model secara tertib dan terarah.

6.4 Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 3 adalah sistem molekul sederhana yang digunakan untuk mempelajari pengaruh **metode Hartree–Fock** dan **fungsi basis** terhadap **energi total**, **panjang ikatan**, dan **biaya komputasi**. Molekul model dipilih bukan hanya karena ukurannya kecil dan mudah dihitung, tetapi karena masing-masing mewakili karakter ikatan yang berbeda. Dengan demikian, mahasiswa dapat melihat bahwa perubahan basis set tidak hanya memengaruhi angka energi, tetapi juga berhubungan dengan sifat ikatan, polaritas, jumlah elektron, ukuran molekul, dan kompleksitas distribusi elektron.

Molekul model dalam Praktikum 3 adalah:

1. **H₂**
2. **LiH**
3. **HF**
4. **H₂O**
5. **CH₄**

Kelima molekul tersebut membentuk urutan pedagogis yang sistematis. H₂ mewakili molekul kovalen nonpolar paling sederhana. LiH memperkenalkan ikatan polar dengan unsur logam alkali dan hidrogen. HF memperlihatkan ikatan polar kuat antara H dan unsur sangat elektronegatif. H₂O memperkenalkan molekul bengkok dengan pasangan elektron bebas. CH₄ memperkenalkan molekul tetrahedral dengan beberapa ikatan setara. Dengan urutan ini, mahasiswa dapat memahami pengaruh basis set mulai dari sistem paling sederhana sampai molekul poliatomik yang lebih kompleks.

Pemilihan molekul model dalam praktikum Hartree–Fock harus mempertimbangkan keseimbangan antara **kesederhanaan komputasi** dan **kekayaan konsep kimia**. Molekul yang terlalu besar dapat menyulitkan mahasiswa pemula karena jumlah fungsi basis meningkat cepat, output menjadi panjang, dan waktu komputasi bertambah. Sebaliknya, molekul yang terlalu sederhana tidak cukup menunjukkan variasi ikatan dan geometri. Oleh karena itu, H₂, LiH, HF, H₂O, dan CH₄ menjadi pilihan yang tepat untuk memperlihatkan hubungan antara metode, basis set, energi total, panjang ikatan, dan waktu komputasi.

1. Fungsi Molekul Model dalam Praktikum Hartree–Fock

Molekul model berfungsi sebagai sistem uji yang terkontrol. Dalam Praktikum 3, mahasiswa tidak diminta langsung menghitung molekul besar, reaksi kompleks, atau sistem biologis. Tujuan utama adalah melihat pola dasar: bagaimana energi total berubah ketika basis set diperbesar, bagaimana panjang ikatan dapat berubah ketika basis set diganti, dan bagaimana waktu komputasi meningkat ketika jumlah fungsi basis bertambah.

Setiap molekul model memiliki fungsi pembelajaran tertentu.

Molekul	Karakter Utama	Fokus Pembelajaran
H ₂	Diatomik kovalen nonpolar	Dasar energi HF dan pengaruh basis pada ikatan paling sederhana
LiH	Diatomik polar	Pengaruh basis pada ikatan polar dan atom berbeda ukuran
HF	Diatomik sangat polar	Basis set pada atom elektronegatif dan ikatan polar kuat
H ₂ O	Poliatomik bengkok	Basis set, pasangan elektron bebas, sudut ikatan, dan energi total
CH ₄	Poliatomik tetrahedral	Basis set, simetri, banyak ikatan setara, dan biaya komputasi

Molekul-molekul ini memungkinkan mahasiswa membandingkan tiga hal sekaligus: **ukuran molekul**, **jenis ikatan**, dan **kebutuhan basis set**. H₂ sangat kecil sehingga perhitungan cepat. LiH dan HF tetap diatomik, tetapi lebih kaya karena memiliki polaritas. H₂O dan CH₄ lebih besar

sehingga mulai menunjukkan peningkatan biaya komputasi akibat bertambahnya jumlah atom dan fungsi basis.

2. Prinsip Pemilihan Molekul Model

Pemilihan molekul model dalam Praktikum 3 didasarkan pada beberapa prinsip.

Pertama, molekul harus **sederhana secara komputasi**. Praktikum ini berfokus pada perbandingan beberapa basis set. Jika molekul terlalu besar, mahasiswa akan menghabiskan waktu menunggu perhitungan, bukan menganalisis hasil. Molekul kecil memungkinkan beberapa basis set diuji dalam waktu relatif singkat.

Kedua, molekul harus **bermakna secara kimia**. H_2 , LiH, HF, H_2O , dan CH_4 adalah molekul yang sering dibahas dalam kimia dasar, kimia kuantum, dan kimia fisik. Mahasiswa sudah memiliki pengetahuan awal tentang bentuk dan ikatannya, sehingga hasil komputasi dapat dikaitkan dengan konsep yang telah dikenal.

Ketiga, molekul harus **menunjukkan variasi ikatan**. Jika semua molekul bersifat sama, praktikum menjadi sempit. H_2 nonpolar, LiH polar, HF sangat polar, H_2O bengkok dan polar, sedangkan CH_4 tetrahedral dan nonpolar secara keseluruhan. Variasi ini membantu mahasiswa memahami bahwa basis set tidak bekerja dalam ruang kosong, tetapi berinteraksi dengan karakter elektronik molekul.

Keempat, molekul harus **memungkinkan analisis energi dan geometri**. Semua molekul model dapat dianalisis melalui energi total. H_2 , LiH, dan HF dapat dianalisis melalui panjang ikatan tunggal. H_2O dianalisis melalui panjang O–H dan sudut H–O–H. CH_4 dianalisis melalui panjang C–H dan sudut H–C–H.

Kelima, molekul harus **memiliki data literatur yang mudah ditemukan**. Molekul-molekul ini banyak dibahas dalam literatur kimia fisik, kimia kuantum, dan basis data molekul. Dengan demikian, mahasiswa dapat membandingkan hasil optimasi dengan nilai rujukan secara proporsional.

3. H_2 sebagai Molekul Kovalen Paling Sederhana

H_2 adalah molekul model pertama dan paling sederhana. Molekul ini terdiri atas dua atom hidrogen dan dua elektron. Dalam kimia kuantum, H_2 sering digunakan sebagai sistem awal untuk memahami ikatan kovalen, orbital molekul, energi ikatan, dan pendekatan metode struktur elektronik. Walaupun sangat sederhana, H_2 memiliki nilai pedagogis yang besar karena memungkinkan mahasiswa melihat hubungan antara jarak antarinti, distribusi elektron, dan energi total.

Dalam Praktikum 3, H_2 digunakan untuk memahami pengaruh basis set terhadap energi total dan panjang ikatan. Karena jumlah atom dan elektron sangat sedikit, perhitungan H_2 sangat cepat. Hal ini memungkinkan mahasiswa mencoba beberapa basis set tanpa biaya komputasi besar.

Parameter utama H_2 adalah:

Parameter	Makna
Energi total HF	Energi molekul pada basis set tertentu
Panjang H–H	Geometri ikatan setelah optimasi
Jumlah fungsi basis	Ukuran representasi orbital
Waktu komputasi	Biaya perhitungan

Pada H_2 , basis set minimal seperti STO-3G sudah dapat memberikan gambaran kualitatif ikatan H–H. Namun, basis set yang lebih besar memberi fleksibilitas lebih baik pada orbital molekul. Dalam kerangka Hartree–Fock, memperbesar basis set memberi ruang matematis lebih luas bagi orbital untuk menyesuaikan bentuknya. Mahasiswa dapat mengamati apakah energi total menjadi lebih rendah ketika basis set diperbesar.

Contoh rancangan perhitungan H_2 :

Molekul	Metode	Basis Set	Jenis Perhitungan
H_2	HF	STO-3G	Single point / optimasi
H_2	HF	3-21G	Single point / optimasi
H_2	HF	6-31G	Single point / optimasi
H_2	HF	6-31G(d)	Single point / optimasi

Analisis H_2 harus menekankan bahwa molekul ini adalah sistem dasar untuk memahami konsep, bukan sekadar latihan cepat. Dari H_2 , mahasiswa belajar bahwa basis set memengaruhi energi bahkan pada molekul paling sederhana. Jika pada sistem kecil saja basis set berpengaruh, maka pada molekul lebih besar pengaruhnya dapat menjadi lebih penting.

4. LiH sebagai Model Ikatan Polar dengan Atom Berbeda Ukuran

LiH adalah molekul diatomik yang memperkenalkan karakter ikatan polar. Berbeda dari H_2 yang terdiri atas dua atom identik, LiH terdiri atas lithium dan hidrogen. Perbedaan sifat atom Li dan H menyebabkan distribusi elektron tidak simetris. Karena itu, LiH cocok digunakan untuk memperlihatkan pengaruh basis set pada molekul heteronuklir.

Dalam Praktikum 3, LiH membantu mahasiswa memahami bahwa basis set harus cukup fleksibel untuk menggambarkan distribusi elektron pada atom yang berbeda ukuran dan sifatnya. Lithium memiliki elektron inti dan elektron valensi, sedangkan hidrogen hanya memiliki satu elektron. Perbedaan ini membuat representasi basis pada Li dan H menjadi penting.

Parameter utama LiH:

Parameter	Makna
Energi total HF	Energi elektronik molekul LiH pada basis tertentu
Panjang Li–H	Parameter geometri utama
Jumlah fungsi basis	Banyaknya fungsi untuk menggambarkan Li dan H
Waktu komputasi	Biaya perhitungan

LiH juga penting karena memperkenalkan mahasiswa pada gagasan bahwa ikatan kimia tidak selalu murni kovalen nonpolar. Ikatan Li–H memiliki karakter polar. Dalam analisis praktikum, mahasiswa dapat membandingkan LiH dengan H_2 . Keduanya diatomik, tetapi karakter elektroniknya berbeda.

Perbandingan pedagogis:

Aspek	H_2	LiH
Jenis atom	Homonuklir	Heteronuklir
Polaritas	Nonpolar	Polar
Distribusi elektron	Simetris	Tidak simetris
Fokus analisis	Ikatan kovalen sederhana	Ikatan polar dan basis pada atom berbeda

Dalam analisis basis set, mahasiswa dapat mengamati apakah perubahan basis set memengaruhi energi LiH lebih nyata dibanding H_2 . Jika basis set kecil kurang fleksibel, deskripsi distribusi elektron polar dapat kurang baik. Basis set lebih besar dapat memberi representasi orbital yang lebih memadai.

5. HF sebagai Model Ikatan Sangat Polar

HF adalah molekul diatomik yang sangat penting dalam Praktikum 3 karena memperkenalkan ikatan antara hidrogen dan unsur sangat elektronegatif, yaitu fluor. Ikatan H–F bersifat sangat polar. Fluor memiliki jumlah elektron lebih banyak daripada hidrogen dan memiliki elektronegativitas tinggi. Hal ini membuat HF menjadi sistem sederhana tetapi kaya secara elektronik.

Dalam Praktikum 3, HF digunakan untuk memahami bagaimana basis set memengaruhi energi total dan panjang ikatan pada molekul polar kuat. Atom F memiliki elektron inti dan valensi yang lebih banyak daripada H. Dengan demikian, jumlah fungsi basis yang dibutuhkan untuk menggambarkan orbital F lebih besar dibanding H. Ketika basis set diperbesar, jumlah fungsi basis untuk atom F meningkat, dan waktu komputasi dapat bertambah.

Parameter utama HF:

Parameter	Makna
Energi total HF	Energi molekul HF dengan basis set tertentu
Panjang H–F	Geometri ikatan utama
Jumlah fungsi basis	Ukuran representasi orbital, terutama pada F

Waktu komputasi	Biaya perhitungan
Konvergensi SCF	Validitas energi total

HF juga cocok untuk memperkenalkan fungsi polarisasi. Pada ikatan polar, distribusi elektron dapat berubah arah dan bentuk akibat perbedaan elektronegativitas. Fungsi polarisasi seperti d pada atom berat dapat membantu basis set menggambarkan distorsi kerapatan elektron dalam ikatan. Oleh karena itu, perbandingan HF/6-31G dan HF/6-31G(d) dapat menjadi latihan yang baik.

Namun, mahasiswa harus berhati-hati dalam menafsirkan hasil. Jika energi HF/6-31G(d) lebih rendah daripada HF/6-31G, hal itu menunjukkan basis set lebih fleksibel. Tetapi hasil tersebut tetap berada dalam kerangka Hartree–Fock, sehingga korelasi elektron belum lengkap. Basis set lebih besar tidak otomatis menghilangkan keterbatasan metode Hartree–Fock.

6. H₂O sebagai Model Molekul Bengkok dengan Pasangan Elektron Bebas

H₂O adalah molekul poliatomik yang sangat penting dalam Praktikum 3. Berbeda dari H₂, LiH, dan HF yang diatomik, H₂O memiliki tiga atom dan sudut ikatan. Molekul ini memperkenalkan analisis geometri yang lebih kompleks, yaitu panjang O–H dan sudut H–O–H.

H₂O memiliki atom O sebagai pusat, dua atom H, dan dua pasangan elektron bebas pada O. Menurut teori VSEPR, bentuk molekul H₂O adalah bengkok. Dalam konteks Hartree–Fock dan basis set, H₂O penting karena distribusi elektron pada atom O dan pasangan elektron bebas memerlukan representasi basis yang cukup fleksibel.

Parameter utama H₂O:

Parameter	Makna
Energi total HF	Energi molekul pada basis tertentu
Panjang O–H	Parameter geometri ikatan
Sudut H–O–H	Parameter bentuk molekul
Jumlah fungsi basis	Ukuran ruang orbital, terutama pada O
Waktu komputasi	Biaya perhitungan
Konvergensi SCF	Validitas energi

H₂O memungkinkan mahasiswa melihat bahwa basis set memengaruhi bukan hanya energi, tetapi juga geometri. Pada basis set kecil, panjang O–H dan sudut H–O–H dapat berbeda dari hasil basis set lebih besar. Fungsi polarisasi dapat membantu menggambarkan distribusi elektron yang tidak simetris di sekitar O.

Contoh rancangan analisis H₂O:

Basis Set	Energi Total	Panjang O–H	Sudut H–O–H	Waktu
STO-3G	...	...	...	...

3-21G	...	...	...	...
6-31G	...	...	...	...
6-31G(d)	...	...	...	...

H₂O juga membantu mahasiswa memahami bahwa teori VSEPR dan Hartree–Fock dapat saling melengkapi. VSEPR memberi prediksi bentuk bengkok, sedangkan Hartree–Fock dengan basis set tertentu memberikan nilai numerik panjang ikatan dan sudut ikatan. Jika hasil optimasi menunjukkan H₂O linear, mahasiswa harus memeriksa input, status konvergensi, atau metode perhitungan.

7. CH₄ sebagai Model Tetrahedral dengan Simetri Tinggi

CH₄ adalah molekul model poliatomik dengan simetri tinggi. Atom C berada di pusat dan empat atom H tersusun tetrahedral. Molekul ini penting karena memperlihatkan bagaimana basis set memengaruhi sistem dengan beberapa ikatan setara.

Parameter utama CH₄:

Parameter	Makna
Energi total HF	Energi molekul pada basis set tertentu
Panjang C–H	Parameter utama geometri
Sudut H–C–H	Sudut tetrahedral
Jumlah fungsi basis	Ukuran perhitungan
Waktu komputasi	Biaya komputasi
Kesetaraan ikatan	Indikator kewajaran geometri

CH₄ memiliki lebih banyak atom daripada H₂O. Karena itu, jumlah fungsi basis meningkat lebih banyak ketika basis set diperbesar. Hal ini membuat CH₄ sangat baik untuk memperlihatkan hubungan antara ukuran molekul, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi.

Dalam analisis praktikum, mahasiswa dapat membandingkan H₂O dan CH₄. H₂O memiliki tiga atom dan pasangan elektron bebas. CH₄ memiliki lima atom dan simetri tetrahedral. Keduanya sama-sama molekul poliatomik, tetapi karakter geometri dan elektroniknya berbeda.

Perbandingan H₂O dan CH₄:

Aspek	H ₂ O	CH ₄
Jumlah atom	3	5
Bentuk	Bengkok	Tetrahedral
Pasangan bebas pada atom pusat	Ada	Tidak ada
Polaritas molekul	Polar	Nonpolar secara keseluruhan
Parameter utama	O–H, H–O–H	C–H, H–C–H
Fungsi basis	Penting pada O dan H	Penting pada C dan H

CH₄ juga penting untuk menguji simetri hasil optimasi. Pada geometri yang wajar, panjang C–H relatif setara dan sudut H–C–H mendekati karakter tetrahedral. Jika hasil optimasi menghasilkan ikatan C–H yang sangat berbeda-beda tanpa alasan, mahasiswa harus memeriksa input, urutan atom, atau konvergensi.

8. Perbandingan Pedagogis Kelima Molekul Model

Kelima molekul model dapat dilihat sebagai urutan pembelajaran bertahap.

Urutan	Molekul	Tingkat Kompleksitas	Alasan Pedagogis
1	H ₂	Sangat sederhana	Dasar ikatan kovalen dan energi HF
2	LiH	Diatomik heteronuklir	Memperkenalkan ikatan polar sederhana
3	HF	Diatomik sangat polar	Memperlihatkan kebutuhan basis pada atom elektronegatif
4	H ₂ O	Poliatomik bengkok	Memperkenalkan sudut ikatan dan pasangan bebas
5	CH ₄	Poliatomik tetrahedral	Memperlihatkan simetri dan biaya komputasi lebih besar

Urutan ini membantu mahasiswa memahami bahwa basis set bekerja pada sistem yang berbeda-beda. Pada H₂, mahasiswa melihat prinsip paling sederhana. Pada LiH dan HF, mahasiswa mulai melihat pengaruh polaritas dan atom berbeda. Pada H₂O dan CH₄, mahasiswa melihat pengaruh ukuran molekul dan geometri poliatomik.

Dengan cara ini, praktikum tidak hanya menjadi latihan teknis menghitung energi. Ia menjadi latihan membaca pola kimia dari data komputasi.

9. Status Muatan dan Multiplicity Molekul Model

Semua molekul model dalam Praktikum 3 umumnya diperlakukan sebagai molekul netral tertutup pada keadaan dasar. Oleh karena itu, muatan dan multiplicity yang digunakan adalah:

muatan = 0
multiplicity = 1

Tabel ringkas:

Molekul	Muatan	Multiplicity	Catatan
H ₂	0	1	Singlet tertutup
LiH	0	1	Singlet tertutup
HF	0	1	Singlet tertutup
H ₂ O	0	1	Singlet tertutup
CH ₄	0	1	Singlet tertutup

Multiplicity 1 menunjukkan keadaan singlet, yaitu semua elektron berpasangan. Dalam konteks Hartree–Fock, molekul-molekul ini dapat dihitung dengan pendekatan restricted Hartree–Fock pada keadaan dasar. Jika mahasiswa salah memasukkan muatan atau multiplicity, jumlah elektron dan keadaan spin berubah sehingga hasil energi dan geometri menjadi salah.

Muatan dan multiplicity harus selalu dicatat dalam laporan. Keduanya bukan detail kecil, melainkan bagian dari definisi sistem komputasi.

10. Basis Set yang Disarankan untuk Molekul Model

Untuk Praktikum 3, basis set yang dapat digunakan secara bertahap adalah:

1. **STO-3G**
2. **3-21G**
3. **6-31G**
4. **6-31G(d)**
5. **cc-pVDZ** jika tersedia dan waktu memungkinkan

Urutan ini memungkinkan mahasiswa melihat perubahan dari basis minimal ke basis yang lebih fleksibel. STO-3G digunakan sebagai basis minimal yang cepat. 3-21G dan 6-31G memperkenalkan split-valence basis. 6-31G(d) memperkenalkan fungsi polarisasi. cc-pVDZ memperkenalkan basis correlation-consistent yang lebih sistematis, jika tersedia dalam software yang digunakan.

Contoh rancangan tabel untuk setiap molekul:

Molekul	Metode	Basis Set	Energi Total	Jumlah Fungsi Basis	Waktu
HF	HF	STO-3G	...	...	...
HF	HF	3-21G	...	...	...
HF	HF	6-31G	...	...	...
HF	HF	6-31G(d)	...	...	...

Mahasiswa perlu memahami bahwa basis set yang lebih besar biasanya meningkatkan jumlah fungsi basis. Namun, peningkatan jumlah fungsi basis tidak sama untuk semua molekul. Molekul dengan atom lebih banyak, seperti CH₄, akan mengalami peningkatan ukuran perhitungan lebih besar daripada H₂.

11. Jenis Perhitungan pada Molekul Model

Pada molekul model, mahasiswa dapat menjalankan dua jenis perhitungan:

1. **Single point energy**

2. Optimasi geometri

Single point energy digunakan untuk menghitung energi pada geometri tertentu. Jika semua basis set dihitung pada geometri yang sama, mahasiswa dapat membandingkan pengaruh basis set terhadap energi tanpa pengaruh perubahan geometri.

Optimasi geometri digunakan untuk mencari geometri kesetimbangan pada setiap basis set. Jika optimasi dilakukan dengan beberapa basis set, mahasiswa dapat membandingkan pengaruh basis set terhadap panjang ikatan dan sudut ikatan.

Perbedaan tujuan:

Jenis Job	Tujuan pada Praktikum
Single point energy	Membandingkan energi total antar basis set pada struktur sama
Optimasi geometri	Membandingkan pengaruh basis set terhadap panjang ikatan dan sudut

Untuk praktikum dasar, dosen dapat meminta single point energy terlebih dahulu karena lebih cepat dan lebih mudah dibandingkan optimasi. Setelah itu, satu atau dua molekul dapat dipilih untuk optimasi geometri dengan basis set berbeda. Misalnya, H_2 dan H_2O dipilih untuk optimasi, sedangkan semua molekul dihitung single point energy.

12. Parameter yang Harus Dicatat untuk Setiap Molekul

Setiap perhitungan pada molekul model harus mencatat parameter berikut:

1. Nama molekul.
2. Metode.
3. Basis set.
4. Jenis job.
5. Muatan.
6. Multiplicity.
7. Jumlah fungsi basis.
8. Energi total.
9. Waktu komputasi.
10. Status konvergensi SCF.
11. Panjang ikatan jika optimasi dilakukan.
12. Sudut ikatan jika relevan.

Contoh format pencatatan:

Molekul	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis	Energi Total	Waktu	Status SCF
H_2O	STO-3G	...	...	...	Konvergen
H_2O	3-21G	...	...	...	Konvergen
H_2O	6-31G	...	...	...	Konvergen
H_2O	6-31G(d)	...	...	...	Konvergen

Untuk optimasi geometri:

Molekul	Basis Set	Panjang Ikatan	Sudut Ikatan	Status Optimasi
H ₂ O	STO-3G	O–H = ...	H–O–H = ...	Konvergen
H ₂ O	6-31G(d)	O–H = ...	H–O–H = ...	Konvergen

Pencatatan ini penting karena subbab 6.6 dan 6.8 akan menggunakan data tersebut untuk membuat tabel, grafik, dan file CSV.

13. Contoh Struktur Awal Molekul Model

Struktur awal dapat dibuat melalui Avogadro, ChemCompute, atau ditulis langsung dalam format XYZ. Berikut contoh koordinat awal konseptual. Koordinat ini digunakan sebagai tebakan awal, bukan sebagai data akhir.

H₂

```
2
H2 struktur awal
H  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.000000  0.000000  0.740000
```

LiH

```
2
LiH struktur awal
Li 0.000000  0.000000  0.000000
H  0.000000  0.000000  1.600000
```

HF

```
2
HF struktur awal
H  0.000000  0.000000  0.000000
F  0.000000  0.000000  0.920000
```

H₂O

```
3
H2O struktur awal
O  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.758000  0.000000  0.504000
H -0.758000  0.000000  0.504000
```

CH₄

```
5
```

```
CH4 struktur awal
C  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.629000  0.629000  0.629000
H -0.629000 -0.629000  0.629000
H -0.629000  0.629000 -0.629000
H  0.629000 -0.629000 -0.629000
```

Koordinat tersebut dapat digunakan sebagai titik awal. Jika praktikum menjalankan optimasi geometri, koordinat akhir harus diambil dari hasil optimasi, bukan dari koordinat awal. Jika praktikum hanya menjalankan single point energy, maka energi yang diperoleh berlaku untuk geometri input tersebut.

14. Analisis Kritis terhadap Molekul Model

Meskipun molekul model dalam Praktikum 3 sederhana, mahasiswa tetap harus menganalisisnya secara kritis. Kesederhanaan molekul tidak menjamin hasil otomatis benar. Beberapa hal harus diperhatikan.

Pertama, struktur awal harus masuk akal. Jika H_2 dibuat dengan jarak terlalu pendek atau terlalu panjang, energi single point dapat sangat berbeda. Jika struktur H_2O dibuat linear, hasil single point akan merepresentasikan struktur linear, bukan struktur air yang stabil. Oleh karena itu, geometri input harus diperiksa.

Kedua, basis set harus tersedia untuk semua atom dalam molekul. Tidak semua software atau basis set mendukung semua unsur dengan cara yang sama. Untuk molekul sederhana seperti H, Li, C, O, dan F, basis set umum biasanya tersedia, tetapi mahasiswa tetap harus memeriksa output.

Ketiga, status SCF harus konvergen. Energi yang tidak konvergen tidak boleh dimasukkan ke tabel utama tanpa catatan. Jika SCF gagal, mahasiswa harus memperbaiki input atau menggunakan pengaturan yang sesuai.

Keempat, waktu komputasi harus ditafsirkan hati-hati. Waktu komputasi dapat dipengaruhi oleh hardware, server, beban sistem, dan implementasi software. Karena itu, waktu komputasi lebih baik dianalisis dalam satu platform yang sama. Membandingkan waktu dari ChemCompute dengan waktu dari laptop pribadi tidak selalu adil.

Kelima, hasil Hartree–Fock harus ditafsirkan dengan menyadari keterbatasan korelasi elektron. Jika energi basis set besar lebih rendah, itu bukan berarti hasil sudah eksak. Hartree–Fock tetap memiliki batas metode.

15. Implikasi Pembelajaran Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 3 memiliki implikasi pembelajaran yang kuat. Dari H_2 , mahasiswa memahami dasar pengaruh basis set pada ikatan sederhana. Dari LiH , mahasiswa melihat bahwa perbedaan atom menyebabkan distribusi elektron tidak simetris. Dari HF , mahasiswa memahami pentingnya basis set pada ikatan polar kuat. Dari H_2O , mahasiswa melihat hubungan basis set dengan pasangan elektron bebas dan sudut ikatan. Dari CH_4 , mahasiswa memahami simetri, banyak ikatan setara, dan meningkatnya biaya komputasi pada molekul yang lebih besar.

Dengan demikian, molekul model tidak hanya menjadi objek perhitungan. Molekul model menjadi sarana untuk membangun intuisi kimia komputasi. Mahasiswa belajar bahwa basis set bukan sekadar pilihan teknis, tetapi memengaruhi cara orbital molekul direpresentasikan. Mereka juga belajar bahwa biaya komputasi meningkat seiring bertambahnya jumlah atom dan fungsi basis.

Pemahaman ini akan sangat penting ketika mahasiswa mempelajari DFT, HOMO-LUMO, momen dipol, dan spektrum IR pada bab berikutnya. Semua perhitungan tersebut tetap membutuhkan keputusan tentang metode, basis set, dan molekul model yang tepat.

16. Transisi ke Jalur ChemCompute

Subbab 6.4 telah menetapkan molekul model Praktikum 3, yaitu H_2 , LiH , HF , H_2O , dan CH_4 . Kelima molekul tersebut dipilih untuk memperlihatkan pengaruh basis set pada sistem yang berbeda karakter: kovalen nonpolar, polar, sangat polar, bengkok dengan pasangan bebas, dan tetrahedral simetris.

Subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Pada subbab 6.5, mahasiswa akan diarahkan menjalankan single point energy dan optimasi geometri dengan variasi basis set melalui GAMESS di ChemCompute. Molekul model yang telah dibahas pada subbab ini akan menjadi sistem latihan utama untuk mengumpulkan data energi total, jumlah fungsi basis, panjang ikatan, dan waktu komputasi.

6.5 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 3 adalah prosedur praktikum berbasis web untuk menjalankan perhitungan **Hartree–Fock** dengan beberapa **fungsi basis** menggunakan **GAMESS** melalui platform ChemCompute. Jalur ini dirancang agar mahasiswa dapat mempelajari pengaruh basis set terhadap **energi total**, **panjang ikatan**, **jumlah fungsi basis**, dan **waktu komputasi** tanpa harus terlebih dahulu menginstal software kimia kuantum secara lokal.

Pada Bab 5, ChemCompute telah digunakan sebagai jalur praktikum optimasi geometri. Pada Bab 6, perannya diperluas: mahasiswa tidak hanya menjalankan satu optimasi geometri, tetapi melakukan serangkaian perhitungan dengan variasi basis set. Dengan demikian, ChemCompute menjadi sarana untuk memahami hubungan antara pilihan metodologis dan hasil numerik. Mahasiswa akan melihat bahwa energi HF/STO-3G, HF/3-21G, HF/6-31G, dan HF/6-31G(d) dapat berbeda walaupun molekulnya sama dan metode dasarnya sama-sama Hartree–Fock.

ChemCompute sangat relevan untuk pembelajaran kimia komputasi karena platform berbasis web memindahkan proses komputasi dari komputer lokal ke server jarak jauh. Hal ini mengurangi hambatan instalasi software berat dan memungkinkan mahasiswa menjalankan paket seperti GAMESS melalui browser. Dalam konteks praktikum, ChemCompute juga membantu mahasiswa memilih metode, basis set, dan jenis job melalui antarmuka yang lebih mudah diakses dibanding instalasi lokal. Namun, kemudahan ini tidak boleh membuat mahasiswa memperlakukan ChemCompute sebagai “kotak hitam”. Setiap input, metode, basis set, output, energi, dan status konvergensi tetap harus dibaca dan dicatat secara ilmiah.

1. Pengertian Jalur ChemCompute pada Praktikum 3

Jalur ChemCompute pada Praktikum 3 adalah alur kerja berikut:

```
membuat atau memilih struktur molekul
→ memilih GAMESS sebagai mesin perhitungan
→ memilih metode Hartree-Fock
→ memilih basis set
→ menjalankan single point energy
→ menjalankan optimasi geometri bila diminta
→ mengunduh file output
→ mencatat energi total, jumlah fungsi basis, waktu, dan status SCF
→ menganalisis data dengan Python
```

Jalur ini menempatkan ChemCompute sebagai **platform eksekusi**, sedangkan GAMESS menjadi **program kimia kuantum** yang menjalankan perhitungan. Hartree-Fock adalah metode struktur elektroniknya, sedangkan basis set adalah representasi fungsi matematika yang digunakan untuk membangun orbital molekul.

Dengan demikian, laporan praktikum tidak boleh hanya menulis:

```
Perhitungan dilakukan dengan ChemCompute.
```

Pernyataan tersebut terlalu umum. Penulisan yang benar harus lebih lengkap, misalnya:

```
Perhitungan single point energy H2O dilakukan melalui ChemCompute menggunakan
GAMESS dengan metode Hartree-Fock dan basis set STO-3G, 3-21G, 6-31G, dan 6-
31G(d). Muatan molekul adalah 0 dan multiplicity adalah 1. Energi total, jumlah
fungsi basis, waktu komputasi, dan status konvergensi SCF dicatat dari file
output.
```

Perbedaan ini penting. ChemCompute bukan metode komputasi. GAMESS bukan basis set. Hartree-Fock bukan platform. Basis set bukan sekadar pilihan visual. Setiap istilah memiliki kedudukan metodologis yang berbeda.

2. Tujuan Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 3 memiliki beberapa tujuan operasional dan konseptual.

Pertama, mahasiswa dapat menjalankan perhitungan **single point energy** dengan metode Hartree–Fock pada beberapa basis set. Single point energy digunakan untuk menghitung energi total pada geometri yang sama tanpa mengubah posisi atom. Dengan cara ini, mahasiswa dapat melihat pengaruh basis set terhadap energi total secara lebih langsung.

Kedua, mahasiswa dapat menjalankan **optimasi geometri** dengan variasi basis set. Optimasi geometri memungkinkan mahasiswa melihat apakah panjang ikatan dan sudut ikatan berubah ketika basis set diperbesar. Hal ini melanjutkan keterampilan Bab 5, tetapi kini dikaitkan dengan fungsi basis.

Ketiga, mahasiswa dapat mencatat **jumlah fungsi basis**. Jumlah fungsi basis penting karena menunjukkan ukuran ruang matematis yang digunakan untuk merepresentasikan orbital molekul. Basis set yang lebih besar biasanya memiliki jumlah fungsi basis lebih banyak.

Keempat, mahasiswa dapat mencatat **waktu komputasi**. Waktu komputasi menjadi indikator biaya praktis. Mahasiswa perlu memahami bahwa basis set yang lebih besar tidak hanya mengubah energi, tetapi juga meningkatkan biaya perhitungan.

Kelima, mahasiswa dapat menghasilkan data untuk dianalisis dengan Python pada subbab 6.6. Data yang dikumpulkan dari ChemCompute akan menjadi bahan untuk tabel energi, grafik energi terhadap basis set, grafik waktu komputasi terhadap basis set, dan analisis konvergensi basis set sederhana.

3. Persiapan Sebelum Menggunakan ChemCompute

Sebelum masuk ke ChemCompute, mahasiswa harus menyiapkan empat hal utama:

1. **Molekul model.**
2. **Struktur awal.**
3. **Daftar basis set.**
4. **Format tabel pencatatan data.**

Molekul model pada Praktikum 3 adalah:

H_2 , LiH , HF , H_2O , CH_4

Semua molekul tersebut umumnya diperlakukan sebagai molekul netral tertutup pada keadaan dasar, sehingga parameter awal yang digunakan adalah:

`muatan = 0`

multiplicity = 1

Struktur awal dapat dibuat melalui Avogadro, editor molekul ChemCompute, atau file XYZ sederhana. Untuk single point energy, geometri harus dijaga konsisten jika tujuan utamanya adalah membandingkan basis set pada struktur yang sama. Untuk optimasi geometri, struktur awal digunakan sebagai titik awal optimasi.

Basis set yang disarankan dalam praktikum ini adalah:

STO-3G
3-21G
6-31G
6-31G(d)
cc-pVDZ, jika tersedia dan waktu memungkinkan

Basis set tersebut dipilih agar mahasiswa dapat melihat perkembangan dari basis minimal menuju basis yang lebih fleksibel. Basis set minimal seperti STO-3G cepat, tetapi terbatas. Split-valence basis seperti 3-21G dan 6-31G memberi fleksibilitas lebih baik pada elektron valensi. Fungsi polarisasi seperti (d) pada 6-31G(d) memungkinkan distribusi elektron menyesuaikan bentuk ikatan secara lebih baik.

4. Struktur Folder Kerja

Meskipun ChemCompute berbasis web, mahasiswa tetap harus membuat folder kerja lokal agar file output dan data tidak tercecer. Struktur folder yang disarankan adalah:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set/
├── input/
├── output/
│   ├── h2/
│   ├── lih/
│   ├── hf/
│   ├── h2o/
│   └── ch4/
├── data/
├── gambar/
├── python/
└── laporan/
```

Folder `input/` digunakan untuk menyimpan struktur awal atau file input. Folder `output/` digunakan untuk menyimpan file output dari ChemCompute/GAMESS. Folder `data/` digunakan untuk menyimpan CSV hasil analisis. Folder `gambar/` digunakan untuk menyimpan grafik. Folder `python/` akan digunakan pada subbab 6.6 untuk file analisis Python. Folder `laporan/` digunakan untuk menyimpan laporan akhir.

Contoh penamaan output:

```
output/h2/h2_hf_sto-3g.out
output/h2/h2_hf_3-21g.out
output/h2/h2_hf_6-31g.out
output/h2/h2_hf_6-31g-d.out
```

```
output/h2o/h2o_hf_sto-3g.out
output/h2o/h2o_hf_3-21g.out
output/h2o/h2o_hf_6-31g.out
output/h2o/h2o_hf_6-31g-d.out
```

Penamaan file yang konsisten memudahkan analisis Python. Reprodusibilitas praktikum menuntut input, parameter, versi program, dan output disimpan dengan jelas.

5. Single Point Energy melalui ChemCompute

Single point energy adalah perhitungan energi pada satu geometri tertentu tanpa mengubah posisi atom. Dalam Praktikum 3, single point energy sangat penting karena memungkinkan mahasiswa membandingkan pengaruh basis set terhadap energi total pada geometri yang sama.

Alur single point energy:

```
pilih molekul
→ masukkan geometri
→ pilih GAMESS
→ pilih Hartree-Fock
→ pilih basis set pertama
→ jalankan single point energy
→ unduh output
→ ulangi dengan basis set lain
→ bandingkan energi total
```

Misalnya, untuk H_2O , mahasiswa dapat menggunakan satu geometri awal yang sama, lalu menjalankan:

```
HF/STO-3G
HF/3-21G
HF/6-31G
HF/6-31G(d)
```

Dengan cara ini, geometri tidak berubah. Perbedaan energi yang muncul terutama berasal dari perbedaan basis set. Hal ini penting karena jika mahasiswa langsung melakukan optimasi geometri dengan setiap basis set, maka energi akhir dipengaruhi oleh dua faktor sekaligus: perubahan basis set dan perubahan geometri.

Single point energy cocok untuk menjawab pertanyaan:

Bagaimana energi total berubah ketika basis set diperbesar pada geometri yang sama?

Jawaban terhadap pertanyaan ini akan menjadi dasar grafik energi terhadap basis set pada subbab 6.6 dan 6.8.

6. Optimasi Geometri melalui ChemCompute

Selain single point energy, mahasiswa juga dapat menjalankan optimasi geometri dengan beberapa basis set. Optimasi geometri digunakan untuk melihat pengaruh basis set terhadap panjang ikatan dan bentuk molekul.

Alur optimasi geometri:

```
pilih molekul
→ masukkan struktur awal
→ pilih GAMESS
→ pilih Hartree-Fock
→ pilih basis set
→ pilih geometry optimization
→ jalankan job
→ unduh output
→ periksa konvergensi
→ ambil energi akhir dan geometri akhir
```

Optimasi geometri cocok untuk menjawab pertanyaan:

Bagaimana basis set memengaruhi panjang ikatan dan sudut ikatan hasil optimasi?

Contoh:

- H₂: apakah panjang H–H berubah dari STO-3G ke 6-31G(d)?
- HF: apakah panjang H–F berubah ketika basis set diperbesar?
- H₂O: apakah panjang O–H dan sudut H–O–H berubah?
- CH₄: apakah panjang C–H tetap relatif setara pada basis set berbeda?

Dalam laporan, hasil optimasi harus dilengkapi status konvergensi. Jika optimasi belum konvergen, koordinat akhir belum boleh disebut sebagai geometri kesetimbangan. Dokumen rujukan praktikum menekankan bahwa hasil komputasi harus ditafsirkan secara kimia dan dilaporkan bersama struktur awal, metode, basis, kriteria konvergensi, output, serta interpretasi.

7. Urutan Praktikum yang Direkomendasikan

Agar praktikum berjalan sistematis, urutan kerja yang direkomendasikan adalah:

Tahap 1: Single point energy untuk semua molekul dan semua basis set.
Tahap 2: Optimasi geometri untuk beberapa molekul terpilih.

Tahap 3: Pencatatan energi, jumlah fungsi basis, dan waktu.
 Tahap 4: Pengunduhan dan pengarsipan output.
 Tahap 5: Analisis Python pada subbab 6.6.

Untuk kelas dasar, dosen dapat meminta single point energy untuk semua molekul:

H₂, LiH, HF, H₂O, CH₄

dengan basis set:

STO-3G, 3-21G, 6-31G, 6-31G(d)

Kemudian, optimasi geometri dapat difokuskan pada dua atau tiga molekul, misalnya:

H₂, HF, H₂O

Pendekatan ini lebih efisien. Mahasiswa tetap memperoleh data lengkap untuk energi, tetapi tidak terlalu terbebani waktu optimasi geometri untuk semua kombinasi molekul dan basis set.

Untuk kelas lanjutan, optimasi geometri dapat dilakukan untuk semua molekul dan semua basis set, asalkan waktu dan sumber daya mencukupi.

8. Data yang Harus Dicatat dari ChemCompute/GAMESS

Setelah setiap job selesai, mahasiswa harus mengunduh file output dan mencatat data penting. Data minimal yang harus dicatat adalah:

Data	Keterangan
Molekul	H ₂ , LiH, HF, H ₂ O, atau CH ₄
Software	GAMESS melalui ChemCompute
Metode	Hartree–Fock
Basis set	STO-3G, 3-21G, 6-31G, 6-31G(d), dan seterusnya
Jenis job	Single point energy atau optimasi geometri
Muatan	Umumnya 0
Multiplicity	Umumnya 1
Jumlah fungsi basis	Diambil dari output
Energi total	Biasanya dalam Hartree
Waktu komputasi	Dari output atau catatan platform
Status SCF	Konvergen atau tidak
Status optimasi	Jika menjalankan optimasi geometri
Panjang ikatan	Jika optimasi geometri dilakukan
Sudut ikatan	Jika relevan

Tabel pencatatan awal dapat dibuat seperti berikut:

Molekul	Job	Metode	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis	Energi Total	Waktu	Status SCF
H ₂	SP	HF	STO-3G	...	...	...	...
H ₂	SP	HF	3-21G	...	...	...	...
H ₂	SP	HF	6-31G	...	...	...	...
H ₂	SP	HF	6-31G(d)	...	...	...	...

Data tersebut akan dimasukkan ke kode Python pada subbab 6.6.

9. Membaca Energi Total dari Output

Bagian paling penting dari output adalah energi total Hartree–Fock. Istilah yang muncul dalam output dapat berbeda, tetapi mahasiswa harus mencari bagian yang menunjukkan energi SCF akhir atau energi total akhir.

Contoh istilah yang mungkin dijumpai:

```
SCF energy
FINAL RHF ENERGY
TOTAL ENERGY
ENERGY CONVERGED
```

Mahasiswa harus memastikan bahwa energi yang dicatat adalah energi akhir setelah SCF konvergen, bukan energi iterasi awal. Jika output menampilkan beberapa energi pada beberapa iterasi, yang dicatat adalah energi akhir yang sudah konvergen.

Contoh format catatan:

```
Molekul      : HF
Metode       : Hartree-Fock
Basis set    : 6-31G(d)
Job          : Single point energy
Energi total : ... Hartree
Status SCF   : Konvergen
```

Energi total harus disertai satuan. Satuan yang umum adalah **Hartree**. Jika mahasiswa ingin mengubah ke kJ/mol atau eV, konversi harus dilakukan dengan benar dan dicatat. Namun, untuk Praktikum 3, energi total dalam Hartree sudah cukup.

10. Membaca Jumlah Fungsi Basis

Jumlah fungsi basis adalah data penting karena menjadi penghubung antara basis set dan biaya komputasi. Basis set yang lebih besar biasanya memiliki jumlah fungsi basis lebih banyak. Jumlah fungsi basis memengaruhi ukuran matriks Fock, jumlah integral, memori, dan waktu komputasi.

Dalam output GAMESS, informasi jumlah fungsi basis dapat muncul dalam bagian yang menjelaskan basis, orbital, atau jumlah fungsi atomik. Mahasiswa perlu mencari bagian output yang menunjukkan jumlah fungsi basis, jumlah orbital atomik, atau informasi setara.

Jika jumlah fungsi basis sulit ditemukan, mahasiswa dapat mencatat jumlah fungsi basis dari output yang tersedia atau menggunakan alat bantu lain pada jalur Python/PySCF jika dosen mengizinkan. Namun, untuk jalur ChemCompute, yang utama adalah mahasiswa menyadari bahwa jumlah fungsi basis harus dicatat sebagai indikator ukuran perhitungan.

Contoh catatan:

Molekul	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis
H ₂ O	STO-3G	...
H ₂ O	3-21G	...
H ₂ O	6-31G	...
H ₂ O	6-31G(d)	...

Jumlah fungsi basis ini akan menjadi variabel pada grafik energi terhadap ukuran basis set dan grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set.

11. Membaca Waktu Komputasi

Waktu komputasi dapat dicatat dari output program atau dari informasi job pada platform. Dalam praktikum, waktu komputasi digunakan untuk melihat biaya relatif antar basis set. Namun, mahasiswa harus memahami bahwa waktu komputasi dipengaruhi oleh banyak faktor.

Faktor yang memengaruhi waktu komputasi:

1. Ukuran basis set.
2. Jumlah atom.
3. Jumlah elektron.
4. Jenis job: single point atau optimasi.
5. Jumlah iterasi SCF.
6. Jumlah langkah optimasi geometri.
7. Beban server.
8. Hardware yang digunakan.
9. Pengaturan default software.

Karena ChemCompute berbasis server, waktu komputasi dapat dipengaruhi oleh antrean dan beban sistem. Oleh karena itu, waktu komputasi sebaiknya digunakan sebagai indikator praktis, bukan angka mutlak universal.

Analisis yang tepat:

Pada molekul H_2O , waktu komputasi cenderung meningkat ketika basis set diperbesar. Hal ini berkaitan dengan bertambahnya jumlah fungsi basis dan ukuran matriks yang harus dihitung.

Analisis yang kurang tepat:

Basis set 6-31G(d) selalu membutuhkan waktu tepat dua kali lebih lama daripada 6-31G.

Pernyataan kedua terlalu mutlak. Waktu komputasi dapat berubah tergantung kondisi server dan detail perhitungan.

12. Contoh Jalur ChemCompute untuk H_2O

Berikut contoh alur praktikum untuk H_2O .

Langkah 1 — Menyiapkan struktur

Mahasiswa menyiapkan struktur H_2O dalam bentuk bengkok. Struktur dapat dibuat di Avogadro atau editor ChemCompute.

Contoh koordinat awal:

```
3
H2O struktur awal
O  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.758000  0.000000  0.504000
H -0.758000  0.000000  0.504000
```

Langkah 2 — Menjalankan single point energy

Mahasiswa menjalankan single point energy dengan kombinasi:

```
HF/STO-3G
HF/3-21G
HF/6-31G
HF/6-31G(d)
```

Setiap output diunduh dan disimpan.

Langkah 3 — Mencatat data

Mahasiswa mencatat:

```
basis set
jumlah fungsi basis
energi total
```

waktu komputasi
status SCF

Langkah 4 — Optimasi geometri

Jika diminta, mahasiswa menjalankan optimasi geometri H₂O dengan beberapa basis set, misalnya STO-3G dan 6-31G(d).

Langkah 5 — Analisis awal

Mahasiswa membandingkan apakah energi total menurun ketika basis set diperbesar dan apakah waktu komputasi meningkat.

Contoh narasi awal:

Pada H₂O, energi total Hartree-Fock berubah ketika basis set diperbesar dari STO-3G ke 6-31G(d). Perubahan ini menunjukkan bahwa fungsi basis yang lebih fleksibel memberi representasi orbital molekul yang lebih luas. Namun, waktu komputasi juga meningkat karena jumlah fungsi basis bertambah.

13. Contoh Jalur ChemCompute untuk H₂

H₂ adalah contoh paling sederhana. Jalurnya dapat digunakan sebagai latihan awal sebelum mahasiswa menjalankan molekul lain.

Langkah 1 — Struktur H₂

```
2
H2 struktur awal
H  0.000000  0.000000  0.000000
H  0.000000  0.000000  0.740000
```

Langkah 2 — Single point energy

Jalankan:

```
HF/STO-3G
HF/3-21G
HF/6-31G
HF/6-31G(d)
```

Langkah 3 — Catat energi

Basis Set	Energi Total	Jumlah Fungsi Basis	Waktu	Status SCF
STO-3G	...	...	...	...
3-21G	...	...	...	...
6-31G	...	...	...	...
6-31G(d)	...	...	...	...

Langkah 4 — Interpretasi

Pada H_2 , mahasiswa diharapkan melihat pola dasar pengaruh basis set. Karena molekul ini sangat kecil, perhitungan biasanya cepat. Jika energi berubah ketika basis set diperbesar, hal itu menunjukkan bahwa representasi orbital ikatan H–H bergantung pada basis set.

14. Contoh Jalur ChemCompute untuk HF

HF merupakan contoh yang baik untuk melihat pengaruh basis set pada molekul polar.

Langkah 1 — Struktur HF

```
2
HF struktur awal
H  0.000000  0.000000  0.000000
F  0.000000  0.000000  0.920000
```

Langkah 2 — Variasi basis set

Jalankan single point energy atau optimasi geometri dengan:

```
HF/STO-3G
HF/3-21G
HF/6-31G
HF/6-31G(d)
```

Perhatikan bahwa kata pertama HF dalam HF/STO-3G berarti **Hartree–Fock**, sedangkan molekul HF berarti **hidrogen fluorida**. Ini dapat membingungkan mahasiswa pemula. Karena itu, dalam laporan sebaiknya ditulis lengkap:

Molekul hidrogen fluorida dihitung dengan metode Hartree–Fock menggunakan basis set 6-31G(d).

Langkah 3 — Analisis

Mahasiswa dapat membandingkan energi total dan panjang H–F. Karena HF bersifat polar kuat, basis set yang lebih fleksibel dapat memengaruhi deskripsi kerapatan elektron di sekitar atom F.

15. Validasi Hasil Jalur ChemCompute

Setelah semua output diperoleh, mahasiswa harus melakukan validasi sebelum data dimasukkan ke analisis Python.

Validasi minimal:

1. Apakah molekul yang dihitung benar?
2. Apakah metode benar-benar Hartree–Fock?
3. Apakah basis set sesuai rencana?
4. Apakah muatan 0 dan multiplicity 1?
5. Apakah SCF konvergen?
6. Apakah energi total akhir tercatat?
7. Apakah jumlah fungsi basis tercatat?
8. Apakah waktu komputasi tercatat?
9. Apakah file output sudah disimpan?
10. Apakah nama file output jelas?

Jika salah satu data tidak valid, mahasiswa harus memperbaiki perhitungan atau memberi catatan keterbatasan. Data yang tidak konvergen tidak boleh digabung begitu saja dengan data konvergen.

16. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Dampak
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Laporan kehilangan konteks ilmiah
Tidak mencatat basis set	Energi tidak dapat ditafsirkan
Salah membedakan HF sebagai metode dan HF sebagai molekul	Laporan membingungkan
Tidak mengunduh output	Data tidak dapat diverifikasi
Mencatat energi iterasi awal	Energi total salah
Tidak memeriksa SCF convergence	Data bisa tidak valid
Mencampur single point dan optimasi tanpa penjelasan	Perbandingan energi tidak jelas
Membandingkan waktu dari platform berbeda	Analisis biaya tidak adil
Tidak mencatat jumlah fungsi basis	Grafik basis set tidak lengkap
Menganggap energi lebih rendah selalu berarti hasil pasti benar	Mengabaikan keterbatasan Hartree–Fock

Kesalahan-kesalahan ini perlu diantisipasi sejak awal. ChemCompute memudahkan akses, tetapi tidak menghilangkan kebutuhan berpikir kritis.

17. Checklist Jalur ChemCompute

Checklist berikut dapat digunakan mahasiswa sebelum masuk ke analisis Python.

- [] Molekul model sudah dipilih.
- [] Struktur awal sudah benar.
- [] Software GAMESS dipilih melalui ChemCompute.
- [] Metode Hartree–Fock dipilih.


```
[ ] Basis set sesuai daftar praktikum.
[ ] Muatan molekul adalah 0.
[ ] Multiplicity adalah 1.
[ ] Jenis job single point energy sudah benar.
[ ] Jenis job optimasi geometri sudah benar jika diminta.
[ ] Output setiap perhitungan sudah diunduh.
[ ] Nama file output sudah konsisten.
[ ] Energi total akhir dicatat.
[ ] Jumlah fungsi basis dicatat.
[ ] Waktu komputasi dicatat.
[ ] Status SCF diperiksa.
[ ] Status optimasi diperiksa jika optimasi geometri dilakukan.
[ ] Data siap dimasukkan ke tabel Python.
```

Checklist ini membantu mahasiswa bekerja tertib dan mencegah hilangnya data penting.

18. Analisis Kritis terhadap Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki kelebihan besar dalam pembelajaran. Mahasiswa dapat menjalankan perhitungan kimia kuantum tanpa instalasi lokal yang rumit. Kelas besar dapat menjalankan praktikum lebih mudah. Mahasiswa dapat memusatkan perhatian pada konsep Hartree–Fock, basis set, energi total, dan biaya komputasi.

Namun, jalur ini juga memiliki batas. Pertama, mahasiswa dapat terlalu bergantung pada antarmuka web dan tidak memahami input sebenarnya. Kedua, beberapa pilihan metode atau basis set mungkin bergantung pada ketersediaan platform. Ketiga, waktu komputasi dapat dipengaruhi oleh server dan antrian, sehingga tidak selalu mencerminkan performa komputasi murni. Keempat, output berbasis cloud harus diunduh dan diarsipkan; jika tidak, reproduktibilitas hilang. Dalam model cloud, pengelolaan data output menjadi tantangan penting karena file hasil perlu disimpan dan digunakan kembali dalam analisis Python atau Jupyter.

Karena itu, ChemCompute harus dipakai sebagai sarana pembelajaran, bukan pengganti pemahaman. Mahasiswa tetap harus membaca output, memeriksa konvergensi, mencatat basis set, mencatat energi, dan menafsirkan hasil secara kimia.

19. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memberi pengalaman penting kepada mahasiswa. Mereka belajar bahwa perhitungan kimia kuantum modern dapat dijalankan melalui platform web. Mereka juga belajar bahwa kemudahan akses tetap harus diimbangi dengan kedisiplinan ilmiah. Setiap job harus dicatat. Setiap output harus disimpan. Setiap energi harus diberi konteks metode dan basis set. Setiap waktu komputasi harus ditafsirkan secara hati-hati.

Jalur ini juga memperkenalkan prinsip komputasi ilmiah: data yang baik harus dapat ditelusuri. Jika mahasiswa membuat grafik energi terhadap basis set pada subbab 6.6, grafik tersebut harus dapat ditelusuri kembali ke file output ChemCompute. Jika mahasiswa menyimpulkan bahwa 6-31G(d) lebih mahal daripada STO-3G, kesimpulan itu harus didukung data waktu dan jumlah fungsi basis.

Dengan demikian, jalur ChemCompute melatih mahasiswa menghubungkan teori, software, output, dan analisis.

20. Transisi ke Jalur Python Mandiri

Subbab 6.5 telah menjelaskan cara menjalankan single point energy dan optimasi geometri dengan variasi basis set melalui GAMESS di ChemCompute. Data yang dihasilkan dari jalur ini meliputi energi total, jumlah fungsi basis, waktu komputasi, status SCF, dan parameter geometri bila optimasi dilakukan.

Subbab berikutnya akan membahas jalur Python mandiri. Pada subbab 6.6, mahasiswa akan memasukkan data energi dari beberapa basis set, menyusun tabel metode-basis set-jumlah fungsi basis-energi total-waktu komputasi, membuat grafik energi terhadap ukuran basis set, menghitung selisih energi antar basis set, dan melakukan analisis konvergensi basis set sederhana. Dengan demikian, ChemCompute menghasilkan data komputasi, sedangkan Python mengubah data tersebut menjadi tabel, grafik, dan argumentasi ilmiah.

6.6 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri dalam Praktikum 3 adalah tahap analisis data hasil perhitungan Hartree–Fock dengan variasi basis set. Pada jalur ini, Python tidak terutama digunakan untuk menggantikan ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF sebagai mesin kimia kuantum, tetapi digunakan untuk **mengolah, menyusun, memvisualisasikan, dan menafsirkan data energi total, jumlah fungsi basis, serta waktu komputasi**. Dengan kata lain, Python berperan sebagai alat analisis pascaproses yang mengubah output perhitungan menjadi tabel, grafik, dan kesimpulan ilmiah.

Pada subbab 6.5, mahasiswa telah diarahkan untuk menjalankan perhitungan **single point energy** dan, bila diminta, **optimasi geometri** dengan variasi basis set melalui ChemCompute/GAMESS. Hasil dari jalur tersebut berupa file output yang memuat energi total, status SCF, jumlah fungsi basis, waktu komputasi, dan parameter geometri bila optimasi dilakukan. Data tersebut kemudian dimasukkan ke Python agar dapat dianalisis secara sistematis.

Jalur Python mandiri pada Praktikum 3 wajib memuat lima komponen utama:

1. **Input data energi dari beberapa basis set.**
2. **Tabel metode, basis set, jumlah fungsi basis, energi total, dan waktu komputasi.**
3. **Grafik energi terhadap ukuran basis set.**

4. **Perhitungan selisih energi antar basis set.**
5. **Analisis konvergensi basis set sederhana.**

Kelima komponen tersebut saling berkaitan. Data energi menjadi bahan mentah. Tabel menyusun data agar rapi. Grafik memperlihatkan pola. Selisih energi menunjukkan perubahan antar basis set. Analisis konvergensi basis set membantu mahasiswa menilai apakah penambahan ukuran basis masih memberi perubahan energi yang besar atau sudah mulai kecil. Dengan demikian, Python menjadi alat untuk membaca konsekuensi matematis dari pilihan basis set dalam Hartree–Fock.

1. Kedudukan Python dalam Praktikum 3

Dalam Praktikum 3, Python memiliki tiga kedudukan utama.

Pertama, Python berfungsi sebagai **alat tabulasi data**. Output GAMESS atau software lain biasanya panjang dan tidak langsung siap dimasukkan ke laporan. Mahasiswa harus mengambil nilai energi total, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi dari output, lalu menyusunnya dalam tabel. Python membantu membuat tabel tersebut secara konsisten.

Kedua, Python berfungsi sebagai **alat visualisasi**. Hubungan antara basis set, energi total, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi lebih mudah dibaca melalui grafik. Grafik energi terhadap basis set memperlihatkan kecenderungan energi ketika basis set diperbesar. Grafik waktu komputasi terhadap basis set memperlihatkan biaya perhitungan yang meningkat.

Ketiga, Python berfungsi sebagai **alat analisis numerik sederhana**. Mahasiswa dapat menghitung selisih energi antar basis set, misalnya:

$$\Delta E = E_{\text{basis\_saat\_ini}} - E_{\text{basis\_sebelumnya}}$$

Jika nilai ΔE makin kecil ketika basis set diperbesar, hal itu menunjukkan bahwa energi mulai mendekati konvergensi basis set secara praktis. Analisis ini belum setara dengan ekstrapolasi basis set tingkat lanjut, tetapi cukup untuk praktikum dasar.

Dengan demikian, Python membantu mahasiswa bergerak dari data mentah menuju pemahaman metodologis. Mahasiswa tidak hanya melihat energi sebagai angka, tetapi melihat bagaimana energi berubah ketika ruang basis diperbesar.

2. Data yang Diperlukan

Sebelum menjalankan Python, mahasiswa harus menyiapkan data dari output perhitungan. Data minimal yang diperlukan adalah:

Data	Keterangan
Molekul	H ₂ , LiH, HF, H ₂ O, atau CH ₄
Metode	Hartree–Fock
Basis set	STO-3G, 3-21G, 6-31G, 6-31G(d), dan seterusnya
Jumlah fungsi basis	Diambil dari output software
Energi total	Dalam satuan Hartree
Waktu komputasi	Dalam detik atau menit
Status SCF	Konvergen atau tidak
Jenis job	Single point energy atau optimasi geometri

Data tersebut dapat diperoleh dari file output ChemCompute/GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF. Namun, pada jalur ini diasumsikan mahasiswa memasukkan data secara manual ke file CSV awal atau langsung ke dalam kode Python. Pendekatan manual ini sengaja dipilih untuk praktikum dasar karena mahasiswa perlu belajar membaca output secara teliti sebelum membuat analisis otomatis.

Contoh data awal:

Molekul	Metode	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis	Energi Total	Waktu Komputasi
H ₂ O	HF	STO-3G	7	-74.9600	1.20
H ₂ O	HF	3-21G	13	-75.5800	1.80
H ₂ O	HF	6-31G	13	-75.9800	2.10
H ₂ O	HF	6-31G(d)	18	-76.0100	3.20

Angka pada tabel tersebut hanya contoh format. Mahasiswa harus menggantinya dengan data aktual dari output praktikum.

3. Struktur Folder Jalur Python Mandiri

Agar analisis berjalan tertib, struktur folder yang disarankan adalah:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set/
├── output/
│   ├── h2/
│   ├── lih/
│   ├── hf/
│   ├── h2o/
│   └── ch4/
├── data/
│   └── data_energi_hf_basis_set.csv
├── gambar/
├── python/
│   └── praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
└── laporan/
```

Folder `output/` menyimpan file hasil ChemCompute/GAMESS atau software lain. Folder `data/` menyimpan file CSV input dan output analisis. Folder `gambar/` menyimpan grafik. Folder `python/` menyimpan kode analisis. Folder `laporan/` menyimpan naskah laporan praktikum.

Struktur folder ini penting karena praktikum menghasilkan banyak file. Jika mahasiswa menghitung lima molekul dengan empat basis set, minimal ada dua puluh output perhitungan. Jika file tidak diberi nama dan folder tidak diatur, analisis mudah salah. Reprodusibilitas praktikum menuntut hubungan yang jelas antara output perhitungan, data CSV, kode Python, grafik, dan laporan.

4. Format File CSV Input

Salah satu cara paling tertib adalah membuat file CSV input bernama:

```
data/data_energi_hf_basis_set.csv
```

Format kolom yang disarankan:

```
molekul,metode,basis_set,jumlah_fungsi_basis,energi_total_hartree,waktu_detik,
,status_scf,jenis_job
```

Contoh isi file CSV:

```
molekul,metode,basis_set,jumlah_fungsi_basis,energi_total_hartree,waktu_detik,
,status_scf,jenis_job
H2,HF,STO-3G,2,-1.1167,0.8,Konvergen,SP
H2,HF,3-21G,4,-1.1229,1.0,Konvergen,SP
H2,HF,6-31G,4,-1.1268,1.1,Konvergen,SP
H2,HF,6-31G(d),6,-1.1275,1.4,Konvergen,SP
H2O,HF,STO-3G,7,-74.9600,1.2,Konvergen,SP
H2O,HF,3-21G,13,-75.5800,1.8,Konvergen,SP
H2O,HF,6-31G,13,-75.9800,2.1,Konvergen,SP
H2O,HF,6-31G(d),18,-76.0100,3.2,Konvergen,SP
```

Angka tersebut hanya contoh untuk menunjukkan format. Mahasiswa harus memasukkan nilai aktual dari output masing-masing.

Kolom `status_scf` penting karena energi dari SCF yang tidak konvergen tidak boleh dianalisis sebagai data valid tanpa catatan. Jika ada baris dengan status `Tidak konvergen`, kode tetap dapat membaca data, tetapi mahasiswa harus memberi tanda dan tidak mencampurkannya secara sembarangan dengan data konvergen.

5. Kode Python Jalur Mandiri

Kode Python berikut dirancang untuk membaca data energi dari file CSV, menyusun tabel, membuat grafik energi terhadap jumlah fungsi basis, membuat grafik waktu komputasi terhadap jumlah fungsi basis, menghitung selisih energi antar basis set, dan membuat ringkasan basis set yang paling efisien.

```
# =====
# PRAKTIKUM 3
# HARTREE-FOCK, FUNGSI BASIS, DAN ENERGI TOTAL MOLEKUL
#
# Fungsi kode:
# 1. Membaca data energi dari beberapa basis set.
# 2. Membuat tabel metode, basis set, jumlah fungsi basis,
#    energi total, dan waktu komputasi.
# 3. Membuat grafik energi terhadap ukuran basis set.
# 4. Membuat grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set.
# 5. Menghitung selisih energi antar basis set.
# 6. Menganalisis konvergensi basis set sederhana.
# =====

from pathlib import Path
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# =====
# 1. Definisi folder kerja
# =====

BASE_DIR = Path(__file__).resolve().parent.parent

DATA_DIR = BASE_DIR / "data"
GAMBAR_DIR = BASE_DIR / "gambar"

DATA_DIR.mkdir(exist_ok=True)
GAMBAR_DIR.mkdir(exist_ok=True)

# =====
# 2. Membaca data input
# =====

file_input = DATA_DIR / "data_energi_hf_basis_set.csv"

if not file_input.exists():
    raise FileNotFoundError(
        f"File input tidak ditemukan: {file_input}\n"
        "Buat file data/data_energi_hf_basis_set.csv terlebih dahulu."
    )

df = pd.read_csv(file_input)

# =====
# 3. Validasi kolom wajib
# =====
```

```

kolom_wajib = [
    "molekul",
    "metode",
    "basis_set",
    "jumlah_fungsi_basis",
    "energi_total_hartree",
    "waktu_detik",
    "status_scf",
    "jenis_job"
]

kolom_hilang = [kolom for kolom in kolom_wajib if kolom not in df.columns]

if kolom_hilang:
    raise ValueError(
        "Kolom berikut belum ada dalam file CSV: "
        + ", ".join(kolom_hilang)
    )

# =====
# 4. Membersihkan dan mengurutkan data
# =====

df["molekul"] = df["molekul"].astype(str)
df["metode"] = df["metode"].astype(str)
df["basis_set"] = df["basis_set"].astype(str)
df["status_scf"] = df["status_scf"].astype(str)
df["jenis_job"] = df["jenis_job"].astype(str)

df["jumlah_fungsi_basis"] = pd.to_numeric(
    df["jumlah_fungsi_basis"], errors="coerce"
)

df["energi_total_hartree"] = pd.to_numeric(
    df["energi_total_hartree"], errors="coerce"
)

df["waktu_detik"] = pd.to_numeric(
    df["waktu_detik"], errors="coerce"
)

df = df.sort_values(
    by=["molekul", "jumlah_fungsi_basis", "basis_set"]
).reset_index(drop=True)

# =====
# 5. Memisahkan data konvergen dan tidak konvergen
# =====

df["scf_konvergen"] = df["status_scf"].str.lower().str.contains("konvergen")

data_konvergen = df[df["scf_konvergen"]].copy()
data_tidak_konvergen = df[~df["scf_konvergen"]].copy()

if not data_tidak_konvergen.empty:

```

```

print("\nPERINGATAN: Ada data yang SCF-nya tidak konvergen.")
print(data_tidak_konvergen[
    ["molekul", "basis_set", "energi_total_hartree", "status_scf"]
])

# =====
# 6. Menghitung selisih energi antar basis set
# =====

hasil_selisih = []

for molekul, grup in data_konvergen.groupby("molekul"):
    grup = grup.sort_values(
        by=["jumlah_fungsi_basis", "basis_set"]
    ).reset_index(drop=True)

    grup["energi_sebelumnya"] = grup["energi_total_hartree"].shift(1)
    grup["basis_sebelumnya"] = grup["basis_set"].shift(1)

    grup["delta_E_hartree"] = (
        grup["energi_total_hartree"] - grup["energi_sebelumnya"]
    )

    grup["abs_delta_E_hartree"] = grup["delta_E_hartree"].abs()

    hasil_selisih.append(grup)

data_analisis = pd.concat(hasil_selisih, ignore_index=True)

# =====
# 7. Konversi selisih energi ke kJ/mol
# =====

HARTREE_TO_KJMOL = 2625.49962

data_analisis["delta_E_kJ_mol"] = (
    data_analisis["delta_E_hartree"] * HARTREE_TO_KJMOL
)

data_analisis["abs_delta_E_kJ_mol"] = (
    data_analisis["abs_delta_E_hartree"] * HARTREE_TO_KJMOL
)

# =====
# 8. Menyimpan tabel energi utama
# =====

kolom_tabel_utama = [
    "molekul",
    "metode",
    "basis_set",
    "jumlah_fungsi_basis",
    "energi_total_hartree",
    "waktu_detik",

```



```

        "status_scf",
        "jenis_job"
    ]

    tabel_energi = df[kolom_tabel_utama].copy()

    tabel_energi.to_csv(
        DATA_DIR / "tabel_energi_total_hf_basis_set.csv",
        index=False
    )

    # =====
    # 9. Menyimpan tabel selisih energi
    # =====

    kolom_selisih = [
        "molekul",
        "basis_sebelumnya",
        "basis_set",
        "jumlah_fungsi_basis",
        "energi_total_hartree",
        "delta_E_hartree",
        "abs_delta_E_hartree",
        "delta_E_kJ_mol",
        "abs_delta_E_kJ_mol",
        "waktu_detik"
    ]

    tabel_selisih = data_analisis[kolom_selisih].copy()

    tabel_selisih.to_csv(
        DATA_DIR / "tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv",
        index=False
    )

    # =====
    # 10. Membuat grafik energi terhadap jumlah fungsi basis
    # =====

    for molekul, grup in data_konvergen.groupby("molekul"):
        grup = grup.sort_values(
            by=["jumlah_fungsi_basis", "basis_set"]
        ).reset_index(drop=True)

        plt.figure(figsize=(8, 5))
        plt.plot(
            grup["jumlah_fungsi_basis"],
            grup["energi_total_hartree"],
            marker="o"
        )

        for _, row in grup.iterrows():
            plt.annotate(
                row["basis_set"],
                (row["jumlah_fungsi_basis"], row["energi_total_hartree"]),

```

```

        textcoords="offset points",
        xytext=(5, 5),
        fontsize=8
    )

    plt.xlabel("Jumlah Fungsi Basis")
    plt.ylabel("Energi Total (Hartree)")
    plt.title(f"Energi Total HF terhadap Ukuran Basis Set: {molekul}")
    plt.grid(True)
    plt.tight_layout()

    nama_file = f"{molekul.lower()}_energi_vs_basis_set.png"
    plt.savefig(GAMBAR_DIR / nama_file, dpi=300)
    plt.close()

# =====
# 11. Membuat grafik waktu terhadap jumlah fungsi basis
# =====

for molekul, grup in data_konvergen.groupby("molekul"):
    grup = grup.sort_values(
        by=["jumlah_fungsi_basis", "basis_set"]
    ).reset_index(drop=True)

    plt.figure(figsize=(8, 5))
    plt.plot(
        grup["jumlah_fungsi_basis"],
        grup["waktu_detik"],
        marker="o"
    )

    for _, row in grup.iterrows():
        plt.annotate(
            row["basis_set"],
            (row["jumlah_fungsi_basis"], row["waktu_detik"]),
            textcoords="offset points",
            xytext=(5, 5),
            fontsize=8
        )

    plt.xlabel("Jumlah Fungsi Basis")
    plt.ylabel("Waktu Komputasi (detik)")
    plt.title(f"Waktu Komputasi terhadap Ukuran Basis Set: {molekul}")
    plt.grid(True)
    plt.tight_layout()

    nama_file = f"{molekul.lower()}_waktu_vs_basis_set.png"
    plt.savefig(GAMBAR_DIR / nama_file, dpi=300)
    plt.close()

# =====
# 12. Ringkasan basis set paling efisien
# =====

ringkasan = []

```

```

for molekul, grup in data_analisis.groupby("molekul"):
    grup = grup.sort_values(
        by=["jumlah_fungsi_basis", "basis_set"]
    ).reset_index(drop=True)

    # Mengabaikan basis pertama karena tidak memiliki delta_E
    kandidat = grup.dropna(subset=["abs_delta_E_hartree"]).copy()

    if kandidat.empty:
        continue

    # Definisi sederhana:
    # basis set efisien = perubahan energi sudah relatif kecil,
    # tetapi waktu belum terlalu besar.
    # Skor ini bukan hukum mutlak, hanya alat bantu praktikum.
    kandidat["skor_efisiensi"] = (
        kandidat["abs_delta_E_hartree"] / kandidat["waktu_detik"]
    )

    kandidat = kandidat.sort_values(
        by=["abs_delta_E_hartree", "waktu_detik"],
        ascending=[True, True]
    )

    baris_terpilih = kandidat.iloc[0]

    ringkasan.append({
        "molekul": molekul,
        "basis_set_efisien_sederhana": baris_terpilih["basis_set"],
        "jumlah_fungsi_basis": baris_terpilih["jumlah_fungsi_basis"],
        "energi_total_hartree": baris_terpilih["energi_total_hartree"],
        "abs_delta_E_hartree": baris_terpilih["abs_delta_E_hartree"],
        "abs_delta_E_kJ_mol": baris_terpilih["abs_delta_E_kJ_mol"],
        "waktu_detik": baris_terpilih["waktu_detik"]
    })

tabel_ringkasan = pd.DataFrame(ringkasan)

tabel_ringkasan.to_csv(
    DATA_DIR / "ringkasan_basis_set_efisien.csv",
    index=False
)

# =====
# 13. Menampilkan hasil utama di terminal
# =====

print("\nTabel energi total:")
print(tabel_energi)

print("\nTabel selisih energi antar basis set:")
print(tabel_selisih)

print("\nRingkasan basis set efisien sederhana:")
print(tabel_ringkasan)

```

```
print("\nAnalisis Hartree-Fock dan basis set selesai.")
print(f"File CSV tersimpan di: {DATA_DIR}")
print(f"Grafik tersimpan di: {GAMBAR_DIR}")
```

Kode tersebut dapat dijalankan dari folder utama praktikum dengan perintah:

```
python python/praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Pada Windows PowerShell:

```
python .\python\praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Nama file kode akan ditegaskan secara khusus pada subbab 6.7. Pada subbab ini, yang ditekankan adalah isi dan fungsi kode.

6. Penjelasan Bagian Kode

Kode di atas dibagi menjadi beberapa bagian.

Bagian pertama mendefinisikan folder kerja. Kode menggunakan `pathlib` agar jalur file lebih rapi dan dapat digunakan lintas sistem operasi. Folder `data/` dan `gambar/` dibuat otomatis jika belum ada.

Bagian kedua membaca file input `data_energi_hf_basis_set.csv`. Jika file tersebut belum tersedia, kode akan menghentikan eksekusi dan memberi pesan error. Hal ini penting agar mahasiswa menyadari bahwa data input harus disiapkan terlebih dahulu.

Bagian ketiga memvalidasi kolom wajib. Validasi ini mencegah kesalahan akibat kolom yang hilang atau salah nama. Jika kolom `energi_total_hartree` tidak ada, misalnya, kode tidak dapat menghitung selisih energi.

Bagian keempat membersihkan dan mengurutkan data. Energi, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi diubah menjadi angka. Data diurutkan berdasarkan molekul dan jumlah fungsi basis agar pola analisis lebih jelas.

Bagian kelima memisahkan data konvergen dan tidak konvergen. Data yang SCF-nya tidak konvergen diberi peringatan. Ini penting karena energi dari SCF yang tidak konvergen tidak boleh dipakai secara normal dalam analisis.

Bagian keenam menghitung selisih energi antar basis set untuk setiap molekul. Selisih energi dihitung terhadap basis set sebelumnya setelah data diurutkan berdasarkan jumlah fungsi basis.

Bagian ketujuh mengonversi selisih energi dari Hartree ke kJ/mol. Konversi ini membantu mahasiswa melihat besar perubahan energi dalam satuan yang lebih akrab dalam kimia.

Bagian kedelapan dan kesembilan menyimpan tabel energi utama serta tabel selisih energi ke file CSV.

Bagian kesepuluh membuat grafik energi total terhadap jumlah fungsi basis. Grafik ini membantu mahasiswa melihat apakah energi menurun ketika basis set diperbesar.

Bagian kesebelas membuat grafik waktu komputasi terhadap jumlah fungsi basis. Grafik ini menunjukkan biaya komputasi.

Bagian kedua belas membuat ringkasan basis set yang dianggap efisien secara sederhana. Definisi efisiensi dalam kode ini bukan aturan mutlak, tetapi alat bantu awal untuk mendorong mahasiswa berpikir tentang kompromi antara perubahan energi dan waktu komputasi.

Bagian ketiga belas menampilkan hasil utama di terminal agar mahasiswa dapat memeriksa hasil secara cepat.

7. Input Data Energi dari Beberapa Basis Set

Input data energi adalah dasar seluruh jalur Python. Mahasiswa harus memasukkan data dari beberapa basis set untuk setiap molekul. Minimal, setiap molekul sebaiknya memiliki tiga sampai empat basis set agar pola perubahan energi dapat terlihat.

Contoh kombinasi minimal:

```
STO-3G
3-21G
6-31G
6-31G(d)
```

Jika tersedia, dapat ditambahkan:

```
cc-pVDZ
```

Data energi harus berasal dari output yang SCF-nya konvergen. Jika mahasiswa memasukkan data dari perhitungan yang tidak konvergen, hasil grafik dapat menyesatkan. Oleh karena itu, kolom `status_scf` sangat penting.

Contoh pencatatan yang baik:

```
H2O, HF, 6-31G(d), jumlah fungsi basis, energi total Hartree, waktu detik, SCF konvergen
```

Contoh pencatatan yang tidak baik:

```
H2O, 6-31G(d), energi
```

Contoh kedua tidak lengkap karena tidak menyebutkan metode, jumlah fungsi basis, waktu komputasi, status SCF, dan satuan energi.

8. Tabel Metode, Basis Set, Jumlah Fungsi Basis, Energi Total, dan Waktu Komputasi

Tabel utama yang dihasilkan oleh Python harus memuat lima informasi pokok:

1. **Metode.**
2. **Basis set.**
3. **Jumlah fungsi basis.**
4. **Energi total.**
5. **Waktu komputasi.**

Tabel ini merupakan inti data Praktikum 3. Contoh bentuk tabel:

Molekul	Metode	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis	Energi Total (Hartree)	Waktu (detik)
H ₂	HF	STO-3G	...	...	...
H ₂	HF	3-21G	...	...	...
H ₂	HF	6-31G	...	...	...
H ₂	HF	6-31G(d)	...	...	...
H ₂ O	HF	STO-3G	...	...	...
H ₂ O	HF	6-31G(d)	...	...	...

Tabel ini harus dianalisis, bukan hanya ditampilkan. Mahasiswa harus menulis apakah energi menurun ketika basis set diperbesar, apakah jumlah fungsi basis meningkat, dan apakah waktu komputasi bertambah. Jika ada pola yang tidak sesuai, mahasiswa harus memeriksa data atau menjelaskan kemungkinan penyebabnya.

9. Grafik Energi terhadap Ukuran Basis Set

Grafik energi terhadap ukuran basis set memperlihatkan hubungan antara jumlah fungsi basis dan energi total. Sumbu x dapat berupa jumlah fungsi basis, sedangkan sumbu y adalah energi total dalam Hartree.

Secara konseptual, mahasiswa sering melihat pola:

jumlah fungsi basis meningkat
 → energi total cenderung lebih rendah
 → perubahan energi makin kecil pada basis lebih besar

Namun, pola tersebut harus dibaca hati-hati. Jika basis set yang dibandingkan berasal dari keluarga berbeda, urutannya tidak selalu sepenuhnya sederhana. Karena itu, jumlah fungsi basis dipakai sebagai ukuran praktis, bukan sebagai satu-satunya indikator kualitas basis set.

Grafik energi sangat penting karena membantu mahasiswa melihat prinsip variasional secara empiris. Basis set yang lebih besar memberi ruang fungsi yang lebih luas bagi orbital molekul. Dalam kerangka Hartree–Fock, energi biasanya menurun menuju batas Hartree–Fock ketika basis diperbesar. Namun, batas itu tetap bukan energi eksak karena korelasi elektron dinamis belum sepenuhnya dimasukkan.

Contoh interpretasi grafik:

Grafik energi total H₂O menunjukkan bahwa energi menjadi lebih rendah ketika jumlah fungsi basis meningkat. Penurunan paling besar terjadi dari STO-3G ke basis set yang lebih fleksibel, sedangkan perubahan energi pada basis set yang lebih besar mulai mengecil. Hal ini menunjukkan kecenderungan konvergensi basis set secara sederhana.

10. Grafik Waktu Komputasi terhadap Ukuran Basis Set

Grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set memperlihatkan biaya praktis perhitungan. Sumbu x adalah jumlah fungsi basis, sedangkan sumbu y adalah waktu komputasi dalam detik.

Secara umum, ketika jumlah fungsi basis meningkat, ukuran matriks dalam perhitungan Hartree–Fock meningkat. Akibatnya, waktu komputasi bertambah. Namun, waktu aktual juga dipengaruhi oleh hardware, server, implementasi software, jumlah iterasi SCF, dan jenis job.

Interpretasi grafik waktu harus proporsional. Jika data berasal dari ChemCompute, waktu dapat dipengaruhi oleh kondisi server. Jika data berasal dari laptop pribadi, waktu dipengaruhi spesifikasi perangkat. Oleh karena itu, waktu komputasi sebaiknya digunakan untuk membaca pola relatif dalam platform yang sama.

Contoh interpretasi:

Grafik waktu komputasi menunjukkan bahwa basis set dengan jumlah fungsi basis lebih banyak memerlukan waktu lebih lama. Hal ini wajar karena matriks yang harus dihitung semakin besar. Namun, waktu komputasi juga dapat dipengaruhi kondisi server, sehingga interpretasi harus dilakukan secara hati-hati.

11. Perhitungan Selisih Energi Antar Basis Set

Selisih energi antar basis set adalah bagian penting dari analisis konvergensi basis set sederhana. Selisih dihitung sebagai:

$$\Delta E_n = E_n - E_{(n-1)}$$

dengan E_n adalah energi pada basis set saat ini dan $E_{(n-1)}$ adalah energi pada basis set sebelumnya.

Jika energi menjadi lebih rendah, maka ΔE biasanya bernilai negatif. Untuk melihat besar perubahan tanpa memperhatikan tanda, digunakan nilai absolut:

$$|\Delta E_n| = |E_n - E_{(n-1)}|$$

Jika $|\Delta E|$ makin kecil ketika basis set diperbesar, berarti energi mulai mendekati nilai yang lebih stabil dalam urutan basis set tersebut.

Contoh tabel selisih energi:

Molekul	Basis Sebelumnya	Basis Set	Energi Total	ΔE Hartree	$ \Delta E $ kJ/mol
---	---	---	---	---	---
H ₂ O	STO-3G	3-21G	...	...	...
H ₂ O	3-21G	6-31G	...	...	...
H ₂ O	6-31G	6-31G(d)	...	...	...

Tabel ini memberi dasar argumentasi. Mahasiswa dapat menilai apakah penambahan basis set masih memberi perubahan energi besar atau tidak. Jika perubahan energi dari 6-31G ke 6-31G(d) jauh lebih kecil daripada dari STO-3G ke 3-21G, mahasiswa dapat menyimpulkan bahwa energi mulai lebih stabil terhadap perluasan basis, meskipun belum tentu sepenuhnya konvergen.

12. Analisis Konvergensi Basis Set Sederhana

Konvergensi basis set sederhana dalam praktikum ini berarti mengamati apakah energi total mulai stabil ketika ukuran basis set diperbesar. Analisis ini tidak sama dengan ekstrapolasi basis set tingkat lanjut, tetapi cukup untuk membangun intuisi.

Indikator sederhana konvergensi basis set:

1. Energi total cenderung menurun ketika basis set diperbesar.
2. Selisih energi antar basis set makin kecil.
3. Grafik energi mulai mendatar.
4. Waktu komputasi tetap meningkat.
5. Perubahan energi tambahan tidak selalu sebanding dengan tambahan waktu.

Contoh narasi analisis:

Pada molekul HF, energi total Hartree-Fock menurun ketika basis set diperbesar dari STO-3G ke 6-31G(d). Selisih energi terbesar terjadi pada perubahan dari basis minimal ke basis split-valence, sedangkan penambahan fungsi polarisasi menghasilkan perubahan energi yang lebih kecil. Hal ini menunjukkan bahwa basis

set yang lebih besar memberi representasi orbital yang lebih baik, tetapi keuntungan energi tambahan mulai mengecil.

Mahasiswa harus menghindari klaim berlebihan seperti:

Basis set 6-31G(d) pasti paling benar.

Pernyataan yang lebih tepat:

Dalam data praktikum ini, 6-31G(d) memberi energi lebih rendah daripada basis set yang lebih kecil, tetapi hasil tetap berada dalam kerangka Hartree-Fock dan belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap.

13. Ringkasan Basis Set Paling Efisien

Salah satu output penting jalur Python adalah ringkasan basis set paling efisien. Efisiensi di sini berarti kompromi antara perubahan energi dan waktu komputasi. Basis set efisien bukan selalu basis set dengan energi paling rendah, dan bukan pula basis set tercepat. Basis set efisien adalah basis yang memberikan hasil cukup baik dengan biaya yang masih masuk akal.

Dalam praktikum dasar, efisiensi dapat dianalisis secara sederhana melalui tiga pertanyaan:

1. Basis set mana yang memberi energi jauh lebih rendah daripada basis minimal?
2. Basis set mana yang perubahan energinya mulai kecil dibanding basis sebelumnya?
3. Basis set mana yang waktu komputasinya belum terlalu besar?

Contoh narasi:

Pada H_2O , basis set 6-31G(d) menghasilkan energi lebih rendah daripada 6-31G, tetapi waktu komputasinya juga meningkat. Jika perubahan energi dari 6-31G ke 6-31G(d) relatif kecil dibanding kenaikan waktu, maka 6-31G dapat dipandang lebih efisien untuk latihan cepat, sedangkan 6-31G(d) lebih baik jika dibutuhkan deskripsi geometri dan polarisasi yang lebih baik.

Analisis efisiensi harus disesuaikan dengan tujuan. Untuk praktikum cepat, basis set kecil dapat diterima. Untuk geometri lebih baik, basis dengan fungsi polarisasi lebih disukai. Untuk riset presisi tinggi, Hartree-Fock mungkin tidak cukup dan perlu metode lain.

14. Output yang Dihasilkan Kode

Kode Python pada subbab ini menghasilkan beberapa file:

```
data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
data/ringkasan_basis_set_efisien.csv
```

Selain itu, kode menghasilkan grafik untuk setiap molekul:

```
gambar/h2_energi_vs_basis_set.png
gambar/h2_waktu_vs_basis_set.png
gambar/lih_energi_vs_basis_set.png
gambar/lih_waktu_vs_basis_set.png
gambar/hf_energi_vs_basis_set.png
gambar/hf_waktu_vs_basis_set.png
gambar/h2o_energi_vs_basis_set.png
gambar/h2o_waktu_vs_basis_set.png
gambar/ch4_energi_vs_basis_set.png
gambar/ch4_waktu_vs_basis_set.png
```

File CSV digunakan untuk laporan dan pemeriksaan data. File gambar digunakan untuk visualisasi pola. Grafik energi dan waktu harus dibaca bersama. Energi lebih rendah tanpa memperhatikan waktu dapat menyesatkan, sedangkan waktu cepat tanpa memperhatikan kualitas energi juga tidak cukup.

15. Validasi Hasil Python

Setelah kode dijalankan, mahasiswa harus memvalidasi hasilnya. Validasi meliputi:

1. Apakah semua molekul muncul dalam tabel?
2. Apakah setiap molekul memiliki beberapa basis set?
3. Apakah energi total bertipe angka?
4. Apakah waktu komputasi bertipe angka?
5. Apakah jumlah fungsi basis bertipe angka?
6. Apakah semua data yang dianalisis berasal dari SCF konvergen?
7. Apakah grafik berhasil dibuat?
8. Apakah CSV berhasil disimpan?
9. Apakah urutan basis set masuk akal?
10. Apakah hasil grafik sesuai dengan tabel?

Jika ada data yang tidak masuk akal, mahasiswa harus kembali ke output perhitungan. Misalnya, jika energi 6-31G tiba-tiba jauh lebih tinggi daripada STO-3G, mungkin ada kesalahan input, geometri berbeda, status SCF gagal, atau nilai energi salah salin. Python dapat membantu mendeteksi pola aneh, tetapi tidak dapat mengetahui kebenaran kimia jika data yang dimasukkan salah.

16. Kesalahan Umum Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Dampak
Salah menyalin energi dari output	Grafik dan tabel salah
Tidak mencatat satuan energi	Interpretasi tidak jelas
Mencampur data SP dan optimasi tanpa tanda	Perbandingan tidak valid
Tidak mencatat status SCF	Energi tidak dapat divalidasi
Waktu dari platform berbeda dibandingkan langsung	Analisis biaya tidak adil
Jumlah fungsi basis kosong	Grafik ukuran basis set tidak lengkap
Menganggap basis set terbesar selalu paling efisien	Mengabaikan biaya komputasi
Menganggap energi lebih rendah berarti metode sudah eksak	Mengabaikan keterbatasan Hartree–Fock
Tidak menyimpan CSV	Data sulit diverifikasi
Grafik tanpa interpretasi	Visualisasi tidak bermakna ilmiah

Kesalahan paling serius adalah mencampur data yang tidak sebanding. Misalnya, energi H₂O dari single point pada geometri awal tidak boleh dibandingkan langsung dengan energi H₂O hasil optimasi basis lain tanpa penjelasan. Jika geometri berubah, energi berubah karena dua faktor: basis set dan geometri. Oleh karena itu, jenis job harus selalu dicatat.

17. Contoh Interpretasi Hasil Python

Contoh interpretasi untuk grafik energi:

Grafik energi total H₂ menunjukkan bahwa energi Hartree–Fock menurun ketika jumlah fungsi basis meningkat. Penurunan energi ini sesuai dengan prinsip bahwa basis set lebih besar memberi fleksibilitas lebih tinggi pada orbital molekul. Namun, penurunan energi dari basis menengah ke basis lebih besar tampak lebih kecil dibanding perubahan dari basis minimal, sehingga energi mulai menunjukkan kecenderungan konvergensi basis set sederhana.

Contoh interpretasi untuk grafik waktu:

Grafik waktu komputasi CH₄ menunjukkan peningkatan waktu ketika jumlah fungsi basis bertambah. Hal ini wajar karena CH₄ memiliki lebih banyak atom dan fungsi basis dibanding H₂. Peningkatan waktu menunjukkan adanya biaya komputasi yang harus dipertimbangkan ketika memilih basis set.

Contoh interpretasi efisiensi:

Berdasarkan tabel energi dan waktu, basis set 6-31G dapat dianggap cukup efisien untuk latihan cepat karena memberi energi lebih rendah daripada basis minimal dengan waktu komputasi yang masih rendah. Namun, 6-31G(d) lebih baik untuk pembahasan yang memerlukan fungsi polarisasi, terutama pada molekul seperti H₂O dan HF.

Interpretasi semacam ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami kompromi antara akurasi dan biaya.

18. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki implikasi pembelajaran penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa data komputasi harus diolah secara sistematis. Kedua, mahasiswa memahami bahwa grafik dapat memperlihatkan pola yang tidak mudah terlihat dari tabel mentah. Ketiga, mahasiswa belajar menghitung selisih energi dan membaca konvergensi basis set secara sederhana. Keempat, mahasiswa memahami bahwa basis set lebih besar menurunkan energi tetapi meningkatkan biaya komputasi. Kelima, mahasiswa belajar menyusun argumen ilmiah dari data.

Jalur ini juga melatih literasi data. Dalam kimia komputasi modern, kemampuan menjalankan software saja tidak cukup. Mahasiswa harus mampu mengelola data, membuat grafik, menyimpan CSV, memvalidasi hasil, dan menulis interpretasi kritis. Python menjadi sarana untuk membangun keterampilan tersebut.

19. Transisi ke Nama File Kode

Subbab 6.6 telah menjelaskan jalur Python mandiri untuk menganalisis data Hartree–Fock dan basis set. Kode Python membaca data energi dari beberapa basis set, menyusun tabel metode-basis set-jumlah fungsi basis-energi total-waktu komputasi, membuat grafik energi terhadap ukuran basis set, menghitung selisih energi antar basis set, dan melakukan analisis konvergensi basis set sederhana.

Subbab berikutnya akan menetapkan nama file kode secara khusus. Penetapan nama file penting agar semua mahasiswa menggunakan standar yang sama, file mudah diperiksa, dan output praktikum dapat ditelusuri kembali ke kode yang benar. Nama file tersebut adalah `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py`.

6.7 Nama File Kode

Nama file kode resmi untuk Praktikum 3 adalah:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Nama file tersebut harus digunakan secara konsisten oleh mahasiswa dalam seluruh kegiatan Praktikum 3. Penamaan ini bukan sekadar urusan administratif, tetapi bagian dari disiplin kerja komputasi ilmiah. Dalam praktikum kimia komputasi, file kode adalah pusat penghubung antara **data energi, basis set, jumlah fungsi basis, waktu komputasi, grafik, file CSV, dan laporan praktikum**. Jika nama file tidak konsisten, maka proses pemeriksaan, pengulangan, revisi, dan reproduksi hasil menjadi sulit.

Pada Praktikum 3, kode Python tidak menjalankan semua perhitungan kimia kuantum secara langsung. Perhitungan energi Hartree–Fock dapat berasal dari ChemCompute/GAMESS, ORCA,

Gaussian, Psi4, atau PySCF. Namun, kode Python bertugas mengolah data hasil perhitungan tersebut. Karena itu, nama file `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` harus memperlihatkan identitas praktikum, nomor praktikum, topik metode, dan fokus analisis basis set.

1. Makna Nama File

Nama file:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

dapat diuraikan sebagai berikut:

Bagian Nama File	Makna
praktikum	Menunjukkan bahwa file ini bagian dari kegiatan praktikum
03	Menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 3
hartree_fock	Menunjukkan metode utama yang dianalisis
basis_set	Menunjukkan fokus utama analisis, yaitu variasi fungsi basis
.py	Menunjukkan bahwa file ditulis dalam bahasa Python

Penamaan ini sengaja dibuat deskriptif agar file mudah dikenali. Mahasiswa, dosen, atau pembaca laporan dapat segera mengetahui fungsi file tanpa harus membukanya terlebih dahulu. Dalam proyek komputasi, nama file yang jelas dapat mengurangi kesalahan, terutama ketika jumlah file bertambah banyak.

Secara gaya penamaan Python, nama modul umumnya dianjurkan singkat, huruf kecil, dan dapat memakai garis bawah bila meningkatkan keterbacaan. Oleh karena itu, bentuk `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` sesuai dengan pola penamaan yang mudah dibaca dan konsisten dengan konvensi umum Python. ([Python Enhancement Proposals \(PEPs\)](#))

2. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama file menggunakan huruf kecil dan garis bawah, bukan spasi atau huruf kapital. Penamaan seperti ini lebih aman untuk digunakan lintas sistem operasi dan lebih nyaman dipanggil dari terminal.

Nama yang digunakan:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

lebih baik daripada:

```
Praktikum 03 Hartree Fock Basis Set.py
```

atau:

`Praktikum-03-Hartree-Fock-Basis-Set.py`

Alasannya adalah sebagai berikut.

Pertama, spasi pada nama file sering menyulitkan ketika file dipanggil melalui terminal. Pada Windows PowerShell, Linux, dan macOS, file dengan spasi tetap dapat dijalankan, tetapi membutuhkan tanda kutip atau escape tertentu. Hal ini dapat membingungkan mahasiswa pemula.

Kedua, huruf kapital dapat menimbulkan perbedaan perilaku pada sistem operasi tertentu. Pada beberapa sistem, nama file dengan huruf besar dan kecil diperlakukan berbeda. Dengan menggunakan huruf kecil semua, risiko kekeliruan berkurang.

Ketiga, garis bawah membuat nama file tetap mudah dibaca. Frasa `hartree_fock_basis_set` lebih jelas daripada `hartreefockbasisset`.

Keempat, nama file ini mencerminkan isi kode. File tersebut memang berisi analisis Hartree–Fock dan basis set, bukan analisis optimasi geometri umum atau visualisasi molekul saja.

3. Posisi File dalam Struktur Folder Praktikum

File `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` sebaiknya disimpan dalam folder `python/` agar terpisah dari data, output, gambar, dan laporan.

Struktur folder yang direkomendasikan:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set/
├── input/
├── output/
│   ├── h2/
│   ├── lih/
│   ├── hf/
│   ├── h2o/
│   └── ch4/
├── data/
│   ├── data_energi_hf_basis_set.csv
│   ├── tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
│   ├── tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
│   └── ringkasan_basis_set_efisien.csv
├── gambar/
├── python/
│   └── praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
└── laporan/
```

Struktur tersebut menunjukkan bahwa kode berada dalam folder `python/`, sedangkan data input dan output berada dalam folder `data/`. Grafik disimpan dalam folder `gambar/`. File output dari software kimia kuantum disimpan dalam folder `output/`.

Pemisahan ini penting karena praktikum menghasilkan banyak file. Jika semua file diletakkan dalam satu folder, mahasiswa akan mudah tertukar antara output GAMESS, file CSV, grafik, dan file kode. Struktur folder yang rapi merupakan bagian dari reproduibilitas kerja ilmiah.

4. Hubungan Nama File dengan Reproduibilitas

Reproduibilitas adalah kemampuan suatu hasil komputasi untuk diperiksa dan diulang kembali oleh orang lain atau oleh penulis sendiri pada waktu berbeda. Dalam konteks Praktikum 3, reproduibilitas berarti bahwa tabel energi, grafik energi, grafik waktu, dan ringkasan basis set efisien dapat ditelusuri kembali ke data input dan kode yang digunakan.

Hubungan reproduibilitas dapat digambarkan sebagai berikut:

```

output ChemCompute/GAMESS
    ↓
data/data_energi_hf_basis_set.csv
    ↓
python/praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
    ↓
data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
data/ringkasan_basis_set_efisien.csv
gambar/energi_vs_basis_set.png
gambar/waktu_vs_basis_set.png
    ↓
laporan praktikum
  
```

Jika nama file kode berubah-ubah, misalnya `kode.py`, `analisis.py`, `fix.py`, `final.py`, atau `coba2.py`, maka hubungan antara kode dan output menjadi tidak jelas. Sebaliknya, jika semua mahasiswa menggunakan nama file yang sama, dosen dapat memeriksa kode lebih mudah dan mahasiswa dapat menelusuri hasil dengan lebih tertib.

Nama file yang baku juga membantu ketika praktikum dikembangkan menjadi proyek lebih besar. Pada bab-bab berikutnya, nama file praktikum lain dapat mengikuti pola yang sama, misalnya:

```

praktikum_04_dft_energi_orbital.py
praktikum_05_homo_lumo.py
praktikum_06_momen_dipol.py
praktikum_07_spektrum_ir.py
  
```

Dengan pola ini, seluruh rangkaian praktikum menjadi lebih teratur.

5. Isi Minimal File Kode

File `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` minimal harus memuat bagian-bagian berikut:

1. Header identitas praktikum.
2. Import pustaka Python.
3. Definisi folder kerja.
4. Pembacaan file CSV input.
5. Validasi kolom wajib.
6. Pembersihan data.
7. Pemisahan data konvergen dan tidak konvergen.
8. Pembuatan tabel energi total.
9. Perhitungan selisih energi antar basis set.
10. Konversi selisih energi dari Hartree ke kJ/mol.
11. Pembuatan grafik energi terhadap jumlah fungsi basis.
12. Pembuatan grafik waktu terhadap jumlah fungsi basis.
13. Pembuatan ringkasan basis set efisien.
14. Penyimpanan file CSV hasil analisis.
15. Penyimpanan grafik.
16. Ringkasan output di terminal.

Bagian-bagian tersebut memastikan bahwa file kode benar-benar memenuhi tujuan Praktikum 3. Jika file hanya membaca CSV tetapi tidak membuat grafik, maka belum lengkap. Jika file hanya membuat grafik tetapi tidak menghitung selisih energi, maka belum memenuhi syarat analisis konvergensi basis set sederhana. Jika file tidak menyimpan CSV, maka hasil sulit diverifikasi ulang.

6. Header Identitas File Kode

Setiap file kode harus diawali dengan header yang jelas. Header membantu pembaca mengetahui tujuan file, penulis, konteks praktikum, dan output yang dihasilkan.

Contoh header:

```
# =====
# PRAKTIKUM 3
# HARTREE-FOCK, FUNGSI BASIS, DAN ENERGI TOTAL MOLEKUL
#
# Nama file:
# praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
#
# Fungsi:
# 1. Membaca data energi Hartree-Fock dari beberapa basis set.
# 2. Membuat tabel metode, basis set, jumlah fungsi basis,
#    energi total, dan waktu komputasi.
```



```
# 3. Membuat grafik energi total terhadap ukuran basis set.
# 4. Membuat grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set.
# 5. Menghitung selisih energi antar basis set.
# 6. Menyusun ringkasan basis set efisien.
#
# Penulis:
# .....
#
# Tanggal:
# .....
# =====
```

Header seperti ini penting untuk pembelajaran. Mahasiswa belajar bahwa kode ilmiah perlu didokumentasikan, bukan hanya ditulis agar berjalan. Dalam praktik pemrograman Python, dokumentasi modul dan fungsi membantu menjelaskan maksud kode; PEP 257 mendefinisikan docstring sebagai string literal yang menjadi pernyataan pertama pada modul, fungsi, kelas, atau metode. ([Python Enhancement Proposals \(PEPs\)](#))

Selain header komentar, file juga dapat diberi docstring modul.

Contoh:

```
"""
Praktikum 3: Hartree-Fock, Fungsi Basis, dan Energi Total Molekul.

File ini membaca data energi Hartree-Fock dari beberapa basis set,
membuat tabel energi, menghitung selisih energi antar basis set,
membuat grafik energi terhadap jumlah fungsi basis, membuat grafik
waktu komputasi, dan menyusun ringkasan basis set efisien sederhana.
"""
```

Docstring tersebut berguna jika file kelak dikembangkan menjadi modul yang dapat diimpor atau diperiksa dengan alat dokumentasi.

7. Nama File Input yang Terkait

File kode `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` membutuhkan file input data utama:

`data/data_energi_hf_basis_set.csv`

File CSV tersebut memuat data hasil perhitungan Hartree-Fock dengan beberapa basis set. Kolom yang disarankan adalah:

```
molekul,metode,basis_set,jumlah_fungsi_basis,energi_total_hartree,waktu_detik
,status_scf,jenis_job
```

Hubungan file kode dan file input adalah sebagai berikut:

```
python/praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
    membaca
data/data_energi_hf_basis_set.csv
```

File input tidak boleh diberi nama sembarangan. Nama seperti `data.csv`, `energi.csv`, atau `coba.csv` kurang informatif. Nama `data_energi_hf_basis_set.csv` lebih tepat karena menunjukkan isi file: data energi Hartree–Fock dengan variasi basis set.

Contoh isi minimal file input:

```
molekul,metode,basis_set,jumlah_fungsi_basis,energi_total_hartree,waktu_detik
,status_scf,jenis_job
H2,HF,STO-3G,2,-1.1167,0.8,Konvergen,SP
H2,HF,3-21G,4,-1.1229,1.0,Konvergen,SP
H2,HF,6-31G,4,-1.1268,1.1,Konvergen,SP
H2,HF,6-31G(d),6,-1.1275,1.4,Konvergen,SP
```

Nilai dalam contoh tersebut hanya pola format. Mahasiswa harus mengganti dengan data aktual dari output praktikum.

8. Nama File Output yang Dihasilkan

File `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` harus menghasilkan output yang konsisten. Output utama berupa file CSV dan gambar.

File CSV yang dihasilkan:

```
data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
data/ringkasan_basis_set_efisien.csv
```

File gambar yang dihasilkan:

```
gambar/h2_energi_vs_basis_set.png
gambar/h2_waktu_vs_basis_set.png
gambar/lih_energi_vs_basis_set.png
gambar/lih_waktu_vs_basis_set.png
gambar/hf_energi_vs_basis_set.png
gambar/hf_waktu_vs_basis_set.png
gambar/h2o_energi_vs_basis_set.png
gambar/h2o_waktu_vs_basis_set.png
gambar/ch4_energi_vs_basis_set.png
gambar/ch4_waktu_vs_basis_set.png
```

Nama file output harus menunjukkan isi file. Misalnya, `h2o_energi_vs_basis_set.png` jelas menunjukkan bahwa file tersebut adalah grafik energi H₂O terhadap basis set. Nama seperti `grafik1.png` atau `hasil.png` tidak disarankan karena tidak informatif.

Dalam laporan, mahasiswa dapat menulis:

Grafik energi total H₂O terhadap jumlah fungsi basis diperoleh dari file `gambar/h2o\_energi\_vs\_basis\_set.png`, yang dihasilkan oleh kode `praktikum\_03\_hartree\_fock\_basis\_set.py`.

Pernyataan seperti ini membuat hubungan antara kode, grafik, dan laporan menjadi jelas.

9. Cara Menjalankan File Kode

File kode dijalankan dari folder utama praktikum. Jika struktur folder sudah benar, perintahnya adalah:

```
python python/praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Pada Windows PowerShell, dapat ditulis:

```
python .\python\praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Pada Linux atau macOS:

```
python python/praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Sebelum menjalankan kode, mahasiswa harus memastikan bahwa file input sudah tersedia:

```
data/data_energi_hf_basis_set.csv
```

Jika file input belum tersedia, kode akan gagal membaca data. Hal ini bukan kesalahan Python, tetapi kesalahan persiapan data. Oleh karena itu, urutan kerja yang benar adalah:

```
mengunduh output perhitungan
→ mencatat data energi dan waktu
→ membuat data/data_energi_hf_basis_set.csv
→ menjalankan praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
→ memeriksa CSV dan grafik hasil analisis
```

10. Konsistensi Nama File dengan Laporan Praktikum

Nama file kode harus disebut dalam laporan praktikum. Hal ini penting agar pembaca mengetahui alat analisis yang digunakan.

Contoh penulisan dalam laporan:

Analisis data energi Hartree-Fock dilakukan menggunakan kode Python `praktikum\_03\_hartree\_fock\_basis\_set.py`. Kode ini membaca file

`data\_energi\_hf\_basis\_set.csv`, kemudian menghasilkan tabel energi total, tabel selisih energi antar basis set, grafik energi terhadap jumlah fungsi basis, grafik waktu komputasi terhadap jumlah fungsi basis, dan ringkasan basis set efisien.

Penulisan seperti ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami alur analisis. Mahasiswa tidak hanya menempelkan grafik ke laporan, tetapi menjelaskan dari mana grafik berasal.

Laporan yang baik harus memungkinkan dosen menelusuri kembali data:

```
gambar dalam laporan
→ berasal dari folder gambar/
→ dibuat oleh file Python
→ membaca data CSV
→ data CSV berasal dari output perhitungan
```

Jika alur ini jelas, laporan menjadi lebih dapat dipercaya.

11. Versi File dan Pengendalian Revisi

Dalam praktikum, mahasiswa sering membuat banyak versi file:

```
praktikum_03.py
praktikum_03_revisi.py
praktikum_03_final.py
praktikum_03_final_banget.py
praktikum_03_coba.py
```

Kebiasaan ini perlu dikendalikan. Untuk file resmi yang dikumpulkan, gunakan satu nama:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Jika mahasiswa ingin membuat cadangan, gunakan folder arsip, bukan mengganti nama file utama secara sembarangan.

Contoh struktur arsip:

```
python/
├─ praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
├─ arsip/
│   ├─ praktikum_03_hartree_fock_basis_set_2026-01-10.py
│   └─ praktikum_03_hartree_fock_basis_set_2026-01-12.py
```

Dengan cara ini, file utama tetap konsisten, sedangkan riwayat revisi tetap tersimpan. Pada kelas yang lebih maju, revisi dapat dikelola dengan Git. Namun, untuk praktikum dasar, struktur arsip sederhana sudah cukup.

12. Penamaan Variabel yang Selaras dengan Nama File

Nama file yang baik perlu didukung oleh penamaan variabel yang jelas. Dalam file `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py`, nama variabel sebaiknya mencerminkan isi data.

Contoh nama variabel yang baik:

```
data_energi
tabel_energi
tabel_selisih
ringkasan_basis
jumlah_fungsi_basis
energi_total_hartree
waktu_detik
status_scf
basis_set
molekul
```

Nama variabel yang kurang baik:

```
a
b
x
data1
hasil2
fix
coba
```

Nama variabel yang jelas membantu pembaca memahami kode. Dalam konteks pendidikan, hal ini sangat penting karena kode tidak hanya dijalankan oleh penulis, tetapi juga dibaca oleh dosen dan teman sekelas. Kode praktikum adalah bagian dari komunikasi ilmiah.

13. Penamaan Fungsi dalam File Kode

Jika kode dikembangkan menjadi lebih modular, mahasiswa dapat membuat fungsi. Nama fungsi sebaiknya menggunakan kata kerja yang menggambarkan tugasnya.

Contoh nama fungsi:

```
baca_data_energi()
validasi_kolom()
hitung_selisih_energi()
buat_grafik_energi()
buat_grafik_waktu()
simpan_tabel_csv()
buat_ringkasan_basis_efisien()
```

Nama fungsi seperti ini lebih baik daripada:

```

fungsi1()
proses()
jalan()
coba()
hitung()

```

Nama `hitung()` terlalu umum karena tidak menjelaskan apa yang dihitung. Nama `hitung_selisih_energi()` lebih jelas karena menunjukkan operasi yang dilakukan.

Penamaan fungsi yang baik membantu mahasiswa memecah masalah menjadi bagian-bagian kecil. Ini penting karena analisis basis set melibatkan beberapa langkah: membaca data, membersihkan data, menghitung selisih energi, membuat grafik, dan menyimpan output.

14. Risiko Jika Nama File Tidak Konsisten

Nama file yang tidak konsisten dapat menimbulkan banyak masalah.

Kesalahan Penamaan	Dampak
<code>praktikum3.py</code>	Terlalu umum, tidak menunjukkan topik
<code>basis.py</code>	Tidak menunjukkan metode Hartree–Fock
<code>hf.py</code>	Dapat membingungkan dengan molekul HF
<code>analisis.py</code>	Tidak menunjukkan praktikum dan topik
<code>final.py</code>	Tidak informatif
<code>coba.py</code>	Tidak layak untuk laporan akademik
<code>praktikum_03_hartree_fock.py</code>	Belum menunjukkan fokus basis set
<code>praktikum_03_basis_set.py</code>	Belum menunjukkan metode Hartree–Fock

Nama resmi:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

menghindari ambiguitas tersebut. Nama ini cukup panjang, tetapi informatif. Dalam konteks praktikum akademik, nama informatif lebih penting daripada nama yang terlalu pendek.

15. Hubungan Nama File dengan Pemeriksaan Dosen

Dosen atau asisten praktikum perlu memeriksa banyak file dari banyak mahasiswa. Jika setiap mahasiswa menggunakan nama file berbeda, proses pemeriksaan menjadi lambat. Dengan nama file yang sama, dosen dapat membuat standar pemeriksaan yang lebih mudah.

Misalnya, dosen dapat meminta struktur pengumpulan:

```
NamaMahasiswa_Praktikum03/
```

```
├─ data/
├─ gambar/
├─ python/
│   └─ praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
└─ laporan/
```

Dengan format seperti ini, dosen dapat langsung membuka file kode yang benar tanpa mencari-cari. Hal ini juga membantu jika pemeriksaan dilakukan secara semiotomatis, misalnya dengan menjalankan kode untuk melihat apakah CSV dan grafik terbentuk.

Nama file standar juga membantu mahasiswa. Mereka tidak perlu bingung memilih nama, dan dapat mengikuti instruksi yang sama.

16. Hubungan Nama File dengan Jejak Ilmiah

Dalam kimia komputasi, jejak ilmiah tidak hanya berupa hasil akhir. Jejak ilmiah mencakup input, output, kode, data hasil analisis, grafik, dan laporan. Nama file kode menjadi salah satu bagian dari jejak tersebut.

Jejak ilmiah Praktikum 3 dapat dilihat sebagai rantai berikut:

```
struktur molekul
→ perhitungan HF dengan basis set tertentu
→ output software
→ data energi dalam CSV
→ kode Python
→ tabel dan grafik
→ analisis laporan
→ kesimpulan
```

Jika salah satu mata rantai tidak jelas, hasil praktikum menjadi sulit diverifikasi. Nama file kode yang jelas membantu menjaga rantai tersebut tetap utuh.

Dalam laporan ilmiah yang baik, pembaca dapat mengetahui:

1. Molekul apa yang dihitung.
2. Metode apa yang digunakan.
3. Basis set apa yang digunakan.
4. Software apa yang digunakan.
5. Energi total berapa yang diperoleh.
6. Data dianalisis dengan kode apa.
7. Grafik dibuat dari file apa.
8. Kesimpulan didasarkan pada tabel mana.

Nama file `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py` membantu menjawab poin keenam.

17. Contoh Identitas File dalam Laporan

Mahasiswa dapat menuliskan identitas file kode dalam laporan sebagai berikut:

Nama file kode:

`praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py`

Fungsi kode:

Kode digunakan untuk membaca data energi Hartree-Fock dari beberapa basis set, membuat tabel energi total, menghitung selisih energi antar basis set, membuat grafik energi terhadap jumlah fungsi basis, membuat grafik waktu komputasi terhadap jumlah fungsi basis, dan menyusun ringkasan basis set efisien.

Input kode:

`data/data_energi_hf_basis_set.csv`

Output kode:

`data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv`
`data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv`
`data/ringkasan_basis_set_efisien.csv`
`gambar/*_energi_vs_basis_set.png`
`gambar/*_waktu_vs_basis_set.png`

Bagian ini dapat dimasukkan pada metode praktikum atau lampiran laporan. Dengan demikian, laporan menjadi lebih transparan.

18. Analisis Kritis terhadap Penamaan File

Penamaan file sering dianggap hal kecil, tetapi dalam praktik ilmiah ia memiliki konsekuensi besar. Nama file yang tidak jelas dapat menyebabkan data tertukar, output salah dianalisis, grafik salah dimasukkan, atau laporan tidak dapat diverifikasi. Dalam praktikum yang melibatkan banyak basis set dan banyak molekul, risiko ini meningkat.

Pada Praktikum 3, setiap molekul dapat dihitung dengan beberapa basis set. Jika ada lima molekul dan empat basis set, maka ada sedikitnya dua puluh baris data. Jika ditambah optimasi geometri, jumlah output bertambah. Tanpa penamaan file yang baik, mahasiswa dapat salah memasukkan energi H₂O sebagai energi HF, atau mencampur basis set 6-31G dengan 6-31G(d).

Nama file kode yang jelas tidak menyelesaikan semua masalah, tetapi menjadi titik awal disiplin data. Ia mengajarkan bahwa komputasi ilmiah memerlukan keteraturan. Dalam riset nyata, keteraturan seperti ini sangat penting karena jumlah file dapat mencapai ratusan atau ribuan.

19. Standar Pengumpulan File Kode

Untuk pengumpulan praktikum, mahasiswa sebaiknya menyerahkan minimal:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set/
├── data/
│   ├── data_energi_hf_basis_set.csv
│   ├── tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
│   ├── tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
│   └── ringkasan_basis_set_efisien.csv
├── gambar/
│   ├── h2_energi_vs_basis_set.png
│   ├── h2_waktu_vs_basis_set.png
│   └── ...
├── python/
│   └── praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_03.pdf
```

Jika dosen meminta file output asli dari ChemCompute/GAMESS, tambahkan folder:

```
output/
```

Dengan struktur seperti ini, laporan dapat diperiksa dari tiga sisi: data mentah, kode analisis, dan hasil laporan.

20. Transisi ke Output Kode

Subbab 6.7 telah menetapkan nama file kode resmi untuk Praktikum 3, yaitu:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Nama file tersebut mencerminkan identitas praktikum, nomor praktikum, metode Hartree–Fock, dan fokus analisis basis set. File ini harus disimpan dalam folder `python/` dan digunakan untuk membaca data energi, menghitung selisih energi, membuat grafik energi, membuat grafik waktu komputasi, serta menyimpan file CSV hasil analisis.

Subbab berikutnya akan membahas output kode secara lebih rinci. Pada subbab 6.8, akan dijelaskan tabel energi total, grafik energi vs basis set, grafik waktu komputasi vs basis set, file CSV hasil analisis, dan ringkasan basis set paling efisien.

6.8 Output Kode

Output kode dalam Praktikum 3 adalah seluruh hasil yang dihasilkan oleh file:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

setelah kode membaca data energi Hartree–Fock dari beberapa basis set, menyusun tabel, menghitung selisih energi, membuat grafik, dan menyimpan hasil analisis dalam file CSV. Output

kode tidak boleh dipahami hanya sebagai “hasil program”, tetapi sebagai **bukti analisis komputasi** yang menghubungkan data mentah dari ChemCompute/GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF dengan interpretasi ilmiah tentang pengaruh fungsi basis terhadap energi total dan biaya komputasi.

Dalam Praktikum 3, output kode wajib meliputi:

1. **Tabel energi total.**
2. **Grafik energi vs basis set.**
3. **Grafik waktu komputasi vs basis set.**
4. **File CSV hasil analisis.**
5. **Ringkasan basis set paling efisien.**

Kelima output tersebut harus dibaca sebagai satu kesatuan. Tabel energi total memberi dasar numerik. Grafik energi memperlihatkan pola perubahan energi ketika ukuran basis set bertambah. Grafik waktu komputasi memperlihatkan biaya praktis dari perluasan basis set. File CSV memastikan data dapat diperiksa ulang. Ringkasan basis set paling efisien membantu mahasiswa menyusun kesimpulan metodologis.

1. Kedudukan Output Kode dalam Praktikum 3

Output kode berfungsi sebagai jembatan antara **perhitungan kimia kuantum** dan **analisis ilmiah**. Perhitungan Hartree–Fock menghasilkan energi total, tetapi energi tersebut belum langsung menjadi kesimpulan. Mahasiswa harus menyusun energi ke dalam tabel, membandingkan beberapa basis set, menghitung selisih energi, memeriksa waktu komputasi, dan menilai apakah basis set tertentu cukup efisien untuk tujuan praktikum.

Alur output dapat digambarkan sebagai berikut:

```

file output ChemCompute/GAMESS/ORCA/Gaussian/Psi4/PySCF
    ↓
data/data_energi_hf_basis_set.csv
    ↓
python/praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
    ↓
data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
data/ringkasan_basis_set_efisien.csv
gambar/*_energi_vs_basis_set.png
gambar/*_waktu_vs_basis_set.png
    ↓
laporan praktikum
  
```

Dengan alur tersebut, mahasiswa belajar bahwa data komputasi harus dapat ditelusuri. Grafik dalam laporan harus dapat ditelusuri ke CSV. CSV harus dapat ditelusuri ke kode. Kode harus dapat ditelusuri ke data input. Data input harus dapat ditelusuri ke file output perhitungan.

Inilah prinsip penting dalam komputasi ilmiah: **hasil akhir harus memiliki jejak data yang jelas.** Tanpa jejak ini, kesimpulan praktikum sulit diverifikasi.

2. Output Pertama: Tabel Energi Total

Output pertama adalah **tabel energi total**. Tabel ini merupakan pusat data Praktikum 3 karena memuat hubungan antara molekul, metode, basis set, jumlah fungsi basis, energi total, waktu komputasi, status SCF, dan jenis job.

Nama file tabel energi total:

`data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv`

Kolom yang harus tersedia:

Kolom	Makna
molekul	Nama molekul model, misalnya H ₂ , LiH, HF, H ₂ O, atau CH ₄
metode	Metode komputasi, yaitu HF atau Hartree–Fock
basis_set	Basis set yang digunakan
jumlah_fungsi_basis	Jumlah fungsi basis dalam perhitungan
energi_total_hartree	Energi total dalam satuan Hartree
waktu_detik	Waktu komputasi dalam detik
status_scf	Status konvergensi SCF
jenis_job	Single point energy atau optimasi geometri

Contoh bentuk tabel:

Molekul	Metode	Basis Set	Jumlah Fungsi Basis	Energi Total (Hartree)	Waktu (detik)	Status SCF	Job
H ₂	HF	STO-3G	...	...	...	Konvergen	SP
H ₂	HF	3-21G	...	...	...	Konvergen	SP
H ₂	HF	6-31G	...	...	...	Konvergen	SP
H ₂	HF	6-31G(d)	...	...	...	Konvergen	SP
H ₂ O	HF	STO-3G	...	...	...	Konvergen	SP
H ₂ O	HF	6-31G(d)	...	...	...	Konvergen	SP

Tabel ini harus menjadi rujukan utama dalam laporan. Mahasiswa tidak boleh hanya menampilkan grafik tanpa tabel. Grafik membantu melihat pola, tetapi tabel menyimpan nilai numerik yang dapat diperiksa ulang.

3. Makna Teoretis Tabel Energi Total

Tabel energi total memiliki makna teoretis penting. Dalam metode Hartree–Fock, energi total diperoleh setelah prosedur SCF mencapai konvergensi. Energi ini bergantung pada geometri molekul, metode, basis set, muatan, multiplicity, dan kriteria komputasi.

Dalam literatur standar kimia kuantum seperti Szabo dan Ostlund, Levine, Jensen, serta Cramer, energi Hartree–Fock dipahami sebagai hasil pendekatan variasional dalam ruang fungsi basis tertentu. Artinya, ketika basis set diperbesar, ruang matematis untuk membangun orbital molekul menjadi lebih fleksibel. Energi yang diperoleh umumnya menjadi lebih rendah atau mendekati batas Hartree–Fock.

Namun, tabel energi total harus dibaca hati-hati. Energi lebih rendah pada basis set yang lebih besar tidak berarti hasil sudah eksak. Hartree–Fock tetap belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Dengan demikian, output tabel energi total mengajarkan dua hal sekaligus: **basis set memengaruhi energi**, tetapi **metode tetap memiliki keterbatasan**.

4. Output Kedua: Grafik Energi vs Basis Set

Output kedua adalah **grafik energi total terhadap ukuran basis set**. Grafik ini dibuat untuk setiap molekul model. Nama file yang disarankan:

```
gambar/h2_energi_vs_basis_set.png
gambar/lih_energi_vs_basis_set.png
gambar/hf_energi_vs_basis_set.png
gambar/h2o_energi_vs_basis_set.png
gambar/ch4_energi_vs_basis_set.png
```

Sumbu grafik:

Sumbu	Isi
Sumbu x	Jumlah fungsi basis
Sumbu y	Energi total dalam Hartree

Grafik ini bertujuan memperlihatkan pola perubahan energi ketika basis set diperbesar. Secara konseptual, pola yang sering diharapkan adalah:

```
jumlah fungsi basis bertambah
→ ruang orbital lebih fleksibel
→ energi total cenderung lebih rendah
→ perubahan energi makin kecil pada basis lebih besar
```

Namun, mahasiswa tidak boleh menyimpulkan secara mekanis bahwa semua grafik pasti mulus atau selalu turun sempurna dalam semua keadaan. Jika basis set berasal dari keluarga berbeda, jika geometri tidak sama, jika SCF tidak konvergen, atau jika data salah salin, pola grafik dapat tampak menyimpang. Oleh karena itu, grafik harus selalu diperiksa bersama tabel energi dan status SCF.

5. Contoh Interpretasi Grafik Energi

Contoh interpretasi grafik energi untuk H₂O:

Grafik energi total H₂O menunjukkan bahwa energi Hartree-Fock berubah ketika basis set diperbesar dari STO-3G ke 6-31G(d). Penurunan energi menunjukkan bahwa basis set yang lebih besar memberi fleksibilitas lebih tinggi bagi orbital molekul. Namun, perubahan energi pada basis set yang lebih besar tampak lebih kecil dibanding perubahan dari basis minimal. Hal ini menunjukkan kecenderungan konvergensi basis set sederhana.

Contoh interpretasi untuk H₂:

Pada H₂, perubahan energi terhadap basis set dapat diamati dengan jelas walaupun molekul hanya terdiri atas dua atom. Hal ini menunjukkan bahwa representasi orbital ikatan H-H tetap dipengaruhi oleh pilihan basis set. Karena H₂ sangat kecil, waktu komputasinya relatif rendah sehingga cocok digunakan sebagai sistem awal untuk memahami prinsip variasional.

Contoh interpretasi untuk CH₄:

Pada CH₄, energi total berubah ketika basis set diperbesar. Karena CH₄ memiliki lebih banyak atom dan lebih banyak elektron dibanding H₂, peningkatan basis set menyebabkan jumlah fungsi basis bertambah lebih besar. Grafik energi harus dibaca bersama grafik waktu komputasi agar mahasiswa dapat menilai kompromi antara penurunan energi dan kenaikan biaya.

Interpretasi seperti ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami grafik sebagai bukti ilmiah, bukan sekadar gambar pelengkap laporan.

6. Output Ketiga: Grafik Waktu Komputasi vs Basis Set

Output ketiga adalah **grafik waktu komputasi terhadap ukuran basis set**. Nama file yang disarankan:

gambar/h2_waktu_vs_basis_set.png
gambar/lih_waktu_vs_basis_set.png
gambar/hf_waktu_vs_basis_set.png
gambar/h2o_waktu_vs_basis_set.png
gambar/ch4_waktu_vs_basis_set.png

Sumbu grafik:

Sumbu	Isi
Sumbu x	Jumlah fungsi basis
Sumbu y	Waktu komputasi dalam detik

Grafik ini penting karena Praktikum 3 tidak hanya mempelajari akurasi energi, tetapi juga biaya komputasi. Dalam Hartree–Fock, basis set yang lebih besar meningkatkan jumlah fungsi basis. Jumlah fungsi basis yang lebih banyak membuat matriks Fock dan integral dua-elektron menjadi lebih besar. Akibatnya, waktu komputasi umumnya meningkat.

Secara konseptual:

```
basis set lebih besar
→ jumlah fungsi basis lebih banyak
→ matriks lebih besar
→ proses SCF lebih mahal
→ waktu komputasi bertambah
```

Grafik waktu komputasi membantu mahasiswa memahami bahwa pemilihan basis set adalah keputusan metodologis. Basis set besar dapat memberi energi lebih rendah, tetapi tidak selalu efisien jika tambahan waktu sangat besar sementara perubahan energi kecil.

7. Contoh Interpretasi Grafik Waktu

Contoh interpretasi grafik waktu untuk CH₄:

Grafik waktu komputasi CH₄ menunjukkan peningkatan waktu ketika jumlah fungsi basis bertambah. Hal ini wajar karena CH₄ memiliki lima atom sehingga penambahan basis set meningkatkan ukuran perhitungan lebih besar dibanding H₂. Dengan demikian, CH₄ memperlihatkan hubungan praktis antara ukuran molekul, jumlah fungsi basis, dan biaya komputasi.

Contoh interpretasi untuk H₂:

Pada H₂, waktu komputasi tetap relatif kecil meskipun basis set diperbesar. Hal ini terjadi karena jumlah atom dan elektron sangat sedikit. Namun, pola peningkatan waktu tetap penting sebagai indikasi awal bahwa basis set lebih besar memerlukan sumber daya lebih besar.

Contoh interpretasi untuk H₂O:

Pada H₂O, basis set dengan fungsi polarisasi dapat meningkatkan waktu komputasi. Peningkatan ini harus dibandingkan dengan perubahan energi total. Jika perubahan energi relatif kecil tetapi waktu meningkat cukup besar, maka mahasiswa perlu mendiskusikan apakah basis tersebut efisien untuk tujuan praktikum dasar.

8. Output Keempat: File CSV Hasil Analisis

Output keempat adalah **file CSV hasil analisis**. File CSV sangat penting karena menyimpan data dalam format yang dapat dibaca ulang oleh Python, spreadsheet, editor teks, atau software statistik.

File CSV yang harus dihasilkan:

```
data/tabel_energi_total_hf_basis_set.csv
data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
data/ringkasan_basis_set_efisien.csv
```

Fungsi masing-masing file:

File CSV	Fungsi
tabel_energi_total_hf_basis_set.csv	Menyimpan tabel energi utama
tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv	Menyimpan selisih energi antar basis set
ringkasan_basis_set_efisien.csv	Menyimpan rekomendasi efisiensi sederhana

CSV harus diperlakukan sebagai data resmi analisis. Jika mahasiswa mengedit tabel di laporan, file CSV asli tetap harus disimpan. Hal ini penting agar data tidak hilang dan dapat diperiksa ulang.

9. Tabel Selisih Energi Antar Basis Set

Salah satu file CSV terpenting adalah:

```
data/tabel_selisih_energi_antar_basis_set.csv
```

Tabel ini menunjukkan perubahan energi dari satu basis set ke basis set berikutnya. Kolom yang disarankan:

Kolom	Makna
molekul	Nama molekul
basis_sebelumnya	Basis set pembandingan sebelumnya
basis_set	Basis set saat ini
jumlah_fungsi_basis	Jumlah fungsi basis basis set saat ini
energi_total_hartree	Energi total basis set saat ini
delta_E_hartree	Selisih energi terhadap basis sebelumnya
abs_delta_E_hartree	Nilai mutlak selisih energi
delta_E_kJ_mol	Selisih energi dalam kJ/mol
abs_delta_E_kJ_mol	Nilai mutlak selisih energi dalam kJ/mol
waktu_detik	Waktu komputasi

Rumus yang digunakan:

$$\Delta E = E_{\text{basis\_saat\_ini}} - E_{\text{basis\_sebelumnya}}$$

Jika energi menurun, ΔE bernilai negatif. Untuk membaca besar perubahan tanpa memperhatikan tanda, digunakan:

$$|\Delta E| = |E_{\text{basis\_saat\_ini}} - E_{\text{basis\_sebelumnya}}|$$

Konversi Hartree ke kJ/mol digunakan agar mahasiswa dapat melihat besar perubahan energi dalam satuan yang lebih akrab dalam kimia. Namun, energi total utama tetap sebaiknya disimpan dalam Hartree karena itulah satuan umum output kimia kuantum.

10. Makna Analisis Selisih Energi

Analisis selisih energi membantu mahasiswa memahami konvergensi basis set sederhana. Jika penambahan basis set menghasilkan perubahan energi yang makin kecil, maka energi mulai mendekati nilai yang lebih stabil dalam deret basis tersebut.

Contoh interpretasi:

Perubahan energi dari STO-3G ke 3-21G relatif besar, sedangkan perubahan dari 6-31G ke 6-31G(d) lebih kecil. Hal ini menunjukkan bahwa penambahan basis dari minimal ke split-valence memberi perbaikan besar, sedangkan penambahan fungsi polarisasi memberikan perbaikan tambahan yang lebih kecil tetapi tetap bermakna.

Namun, interpretasi ini harus hati-hati. Jika basis set yang dibandingkan berasal dari keluarga yang berbeda, urutan jumlah fungsi basis tidak selalu menggambarkan kualitas secara sempurna. Selain itu, penurunan energi dalam Hartree–Fock hanya menunjukkan perbaikan dalam ruang Hartree–Fock, bukan perbaikan menuju energi eksak penuh.

11. Output Kelima: Ringkasan Basis Set Paling Efisien

Output kelima adalah **ringkasan basis set paling efisien**. Nama file:

data/ringkasan_basis_set_efisien.csv

Ringkasan ini bertujuan membantu mahasiswa menilai kompromi antara energi dan biaya komputasi. Basis set paling efisien tidak selalu berarti basis set dengan energi paling rendah. Basis set paling efisien adalah basis set yang memberikan hasil cukup baik dengan waktu komputasi yang masih wajar untuk tujuan praktikum.

Kolom yang disarankan:

Kolom	Makna
molekul	Nama molekul
basis_set_efisien_sederhana	Basis set yang dinilai efisien
jumlah_fungsi_basis	Jumlah fungsi basis
energi_total_hartree	Energi total
abs_delta_E_hartree	Besar perubahan energi
abs_delta_E_kJ_mol	Besar perubahan energi dalam kJ/mol
waktu_detik	Waktu komputasi

Ringkasan ini harus disebut “sederhana” karena definisi efisiensi dalam praktikum dasar belum melibatkan seluruh kriteria profesional. Dalam penelitian lanjutan, pemilihan basis set dapat mempertimbangkan validasi literatur, energi relatif, geometri, frekuensi vibrasi, korelasi elektron, efek pelarut, dan tujuan perhitungan. Namun, untuk Praktikum 3, ringkasan efisiensi sederhana sudah cukup untuk mengajarkan kompromi antara akurasi dan waktu.

12. Contoh Interpretasi Ringkasan Efisiensi

Contoh interpretasi ringkasan efisiensi:

Untuk H_2 , basis set 6-31G(d) memberikan energi lebih rendah dibanding basis set yang lebih kecil, tetapi kenaikan waktu komputasi masih relatif kecil karena molekul sangat sederhana. Oleh karena itu, penggunaan basis set lebih besar masih praktis pada H_2 .

Contoh untuk CH_4 :

Pada CH_4 , basis set yang lebih besar meningkatkan waktu komputasi lebih nyata dibanding H_2 . Jika perubahan energi dari 6-31G ke 6-31G(d) relatif kecil tetapi waktu meningkat, maka 6-31G dapat dipandang cukup efisien untuk latihan cepat, sedangkan 6-31G(d) lebih tepat jika pembahasan membutuhkan fungsi polarisasi.

Contoh untuk H_2O :

Pada H_2O , fungsi polarisasi dapat memberi manfaat karena molekul memiliki pasangan elektron bebas pada atom O dan bentuk bengkok. Oleh karena itu, meskipun 6-31G(d) lebih mahal daripada 6-31G, basis ini dapat lebih bermakna untuk pembahasan geometri dan distribusi elektron.

Interpretasi ini menunjukkan bahwa efisiensi tidak dapat dinilai hanya dari satu angka. Efisiensi bergantung pada tujuan praktikum.

13. Standar Kualitas Output Kode

Output kode harus memenuhi standar berikut:

Aspek	Standar
Kelengkapan	Semua molekul dan basis set muncul
Konsistensi	Nama molekul, metode, dan basis set ditulis seragam
Satuan	Energi dalam Hartree, waktu dalam detik
Validitas	Data berasal dari SCF konvergen
Keterlacakan	Output dapat ditelusuri ke file input
Visualisasi	Grafik memiliki judul, label sumbu, dan nama basis set
Reprodusibilitas	CSV dan gambar tersimpan dalam folder yang benar
Interpretasi	Tabel dan grafik dibahas dalam laporan

Output yang tidak memenuhi standar tersebut belum layak dimasukkan ke laporan final. Misalnya, grafik tanpa label sumbu tidak boleh digunakan karena pembaca tidak tahu apa yang diplot. Tabel tanpa satuan energi juga tidak lengkap.

14. Validasi Output Tabel

Validasi tabel dilakukan dengan memeriksa beberapa hal:

1. Apakah semua molekul muncul?
2. Apakah semua basis set yang direncanakan muncul?
3. Apakah energi total berupa angka?
4. Apakah jumlah fungsi basis berupa angka?
5. Apakah waktu komputasi berupa angka?
6. Apakah status SCF tertulis jelas?
7. Apakah jenis job tertulis jelas?
8. Apakah ada data kosong?
9. Apakah ada energi yang tampak sangat menyimpang?
10. Apakah urutan basis set masuk akal?

Jika ditemukan data aneh, mahasiswa harus kembali ke output asli. Kesalahan dapat berasal dari salah salin energi, salah memasukkan basis set, memasukkan data dari job yang tidak konvergen, atau mencampur single point dengan optimasi geometri.

15. Validasi Output Grafik

Validasi grafik dilakukan dengan memeriksa:

1. Apakah grafik berhasil tersimpan?
2. Apakah nama file grafik sesuai molekul?
3. Apakah sumbu x menunjukkan jumlah fungsi basis?
4. Apakah sumbu y menunjukkan energi atau waktu sesuai grafik?
5. Apakah label basis set muncul?
6. Apakah grafik energi dan grafik waktu tidak tertukar?
7. Apakah grafik sesuai dengan tabel CSV?
8. Apakah grafik cukup jelas untuk laporan?
9. Apakah tidak ada titik data yang hilang?
10. Apakah grafik tidak menampilkan data SCF tidak konvergen tanpa catatan?

Grafik adalah alat komunikasi ilmiah. Grafik yang salah dapat menghasilkan kesimpulan salah, bahkan jika tabelnya benar. Karena itu, grafik harus divalidasi sebelum dimasukkan ke laporan.

16. Kesalahan Umum pada Output Kode

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari:

Kesalahan	Dampak
File CSV tidak tersimpan	Data tidak dapat diperiksa ulang
Grafik tidak dibuat	Pola energi dan waktu sulit dilihat
Sumbu grafik tidak diberi label	Grafik tidak informatif
Energi tidak memakai satuan Hartree	Interpretasi membingungkan
Waktu tidak memakai satuan jelas	Analisis biaya tidak valid
Data tidak konvergen tetap dipakai	Kesimpulan dapat salah
Data SP dan optimasi dicampur	Perbandingan energi tidak sah
Nama file grafik tidak jelas	Sulit ditelusuri ke molekul tertentu
Basis set tertukar	Seluruh analisis dapat keliru
Ringkasan efisiensi dianggap mutlak	Mengabaikan tujuan perhitungan

Kesalahan paling serius adalah menggunakan energi dari perhitungan yang tidak konvergen. Jika SCF tidak konvergen, energi tidak boleh digunakan sebagai dasar grafik dan kesimpulan utama tanpa penjelasan.

17. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum

Output kode harus masuk ke laporan secara tertib. Struktur pemanfaatannya dapat dibuat sebagai berikut:

Bagian Laporan	Output yang Digunakan
Hasil Perhitungan	Tabel energi total
Analisis Basis Set	Grafik energi vs basis set
Analisis Biaya	Grafik waktu komputasi vs basis set
Analisis Konvergensi	Tabel selisih energi
Kesimpulan Efisiensi	Ringkasan basis set efisien
Lampiran	CSV dan file kode

Contoh narasi dalam laporan:

Tabel energi total diperoleh dari file `tabel\_energi\_total\_hf\_basis\_set.csv`, yang dihasilkan oleh kode `praktikum\_03\_hartree\_fock\_basis\_set.py`. Grafik energi terhadap jumlah fungsi basis menunjukkan kecenderungan penurunan energi ketika basis set diperbesar. Grafik waktu komputasi menunjukkan bahwa basis set dengan jumlah fungsi basis lebih besar memerlukan waktu lebih lama.

Narasi tersebut menunjukkan hubungan antara output kode dan analisis ilmiah.

18. Analisis Kritis terhadap Output Kode

Output kode harus dibaca secara kritis. Python hanya mengolah data yang diberikan. Jika data input salah, output Python juga salah. Jika mahasiswa salah memasukkan energi, salah mencatat basis set, atau mencampur data dari job berbeda, maka tabel dan grafik akan menyesatkan.

Prinsip penting:

Python tidak memperbaiki data kimia yang salah.
Python hanya mengolah data sesuai input yang diberikan.

Karena itu, validasi output harus selalu dilakukan dengan kembali ke file output perhitungan. Mahasiswa harus memeriksa apakah energi berasal dari SCF konvergen, apakah basis set sesuai, apakah molekul benar, dan apakah jenis job sama.

Analisis kritis juga berlaku pada ringkasan basis set efisien. Ringkasan ini hanya alat bantu sederhana. Basis set yang dianggap efisien dalam praktikum belum tentu paling tepat untuk riset. Untuk penelitian, pemilihan basis set harus mempertimbangkan literatur, sifat yang dihitung, ukuran sistem, metode korelasi, dan kebutuhan akurasi.

19. Implikasi Pedagogis Output Kode

Output kode pada Praktikum 3 memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar bahwa data kimia kuantum harus disusun secara sistematis. Kedua, mahasiswa memahami bahwa energi total tidak berdiri sendiri, tetapi berkaitan dengan metode, basis set, dan ukuran ruang orbital. Ketiga, mahasiswa melihat langsung bahwa basis set lebih besar dapat menurunkan energi tetapi meningkatkan waktu komputasi. Keempat, mahasiswa belajar membaca grafik sebagai dasar argumentasi. Kelima, mahasiswa belajar bahwa efisiensi adalah kompromi, bukan sekadar memilih hasil paling rendah energinya.

Keterampilan ini penting untuk bab-bab berikutnya. Ketika mahasiswa kelak menggunakan DFT, HOMO-LUMO, momen dipol, atau spektrum IR, mereka sudah memahami bahwa pilihan basis set akan memengaruhi hasil dan biaya. Dengan demikian, output kode pada Praktikum 3 bukan hanya produk teknis, tetapi latihan literasi komputasi ilmiah.

20. Transisi ke Subbab Analisis

Subbab 6.8 telah menjelaskan output kode yang harus dihasilkan oleh `praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py`, yaitu tabel energi total, grafik energi vs basis set, grafik waktu komputasi vs basis set, file CSV hasil analisis, dan ringkasan basis set paling efisien.

Subbab berikutnya akan membahas analisis hasil tersebut. Pada subbab 6.9, mahasiswa akan diarahkan menilai kompromi antara akurasi, ukuran basis set, dan waktu komputasi. Dengan kata lain, subbab 6.8 menghasilkan data dan visualisasi, sedangkan subbab 6.9 menafsirkan makna ilmiahnya.

6.9 Analisis

Analisis dalam Praktikum 3 berfokus pada penilaian **kompromi antara akurasi, ukuran basis set, dan waktu komputasi**. Setelah mahasiswa menjalankan perhitungan Hartree–Fock dengan beberapa fungsi basis, menyusun tabel energi total, membuat grafik energi terhadap ukuran basis set, menghitung selisih energi antar basis set, dan membuat grafik waktu komputasi, tahap berikutnya adalah menafsirkan hasil tersebut secara ilmiah.

Analisis tidak boleh berhenti pada pernyataan sederhana seperti “basis set lebih besar menghasilkan energi lebih rendah” atau “basis set besar membutuhkan waktu lebih lama”. Pernyataan tersebut benar secara umum, tetapi belum cukup untuk menunjukkan pemahaman kimia komputasi. Mahasiswa harus menjelaskan **mengapa energi berubah, mengapa waktu meningkat, apakah perubahan energi masih bermakna, apakah biaya komputasi sebanding dengan perbaikan hasil, dan bagaimana keterbatasan Hartree–Fock memengaruhi interpretasi**.

Dalam Praktikum 3, analisis harus diarahkan pada pertanyaan besar berikut:

Apakah peningkatan ukuran basis set memberikan perbaikan hasil yang sebanding dengan kenaikan biaya komputasi?

Pertanyaan ini penting karena kimia komputasi tidak hanya mengejar hasil paling “besar” atau paling “mahal”. Dalam penelitian dan pembelajaran, metode dan basis set harus dipilih berdasarkan tujuan. Untuk latihan cepat, basis set kecil mungkin cukup. Untuk pembahasan geometri dan distribusi elektron yang lebih baik, basis set dengan fungsi polarisasi lebih layak. Untuk riset presisi tinggi, Hartree–Fock mungkin perlu dilampaui dengan metode yang memasukkan korelasi elektron secara lebih baik. Dengan demikian, analisis Praktikum 3 melatih mahasiswa mengambil keputusan metodologis, bukan sekadar membaca angka.

1. Makna Analisis dalam Praktikum Hartree–Fock dan Basis Set

Analisis hasil Hartree–Fock dan basis set adalah proses menafsirkan hubungan antara **energi total, jumlah fungsi basis, waktu komputasi, dan kualitas hasil**. Dalam konteks praktikum, analisis berarti membaca data secara terstruktur untuk menjawab tiga hal utama:

1. Apakah energi total berubah ketika basis set diperbesar?
2. Apakah waktu komputasi meningkat ketika jumlah fungsi basis bertambah?
3. Apakah basis set tertentu memberikan kompromi yang baik antara kualitas hasil dan biaya komputasi?

Energi total digunakan sebagai indikator kualitas deskripsi elektronik dalam ruang Hartree–Fock tertentu. Jumlah fungsi basis digunakan sebagai indikator ukuran ruang matematis orbital molekul. Waktu komputasi digunakan sebagai indikator biaya praktis. Selisih energi antar basis set digunakan untuk melihat apakah penambahan basis set masih menghasilkan perubahan besar atau mulai mendekati kestabilan.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa “akurasi” dalam praktikum ini harus dibaca secara hati-hati. Energi yang lebih rendah dalam perhitungan Hartree–Fock dengan basis set lebih besar menunjukkan bahwa fungsi gelombang Hartree–Fock memiliki ruang variasional yang lebih fleksibel. Akan tetapi, energi tersebut belum tentu mendekati energi eksak molekul karena Hartree–Fock belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Karena itu, istilah akurasi pada Praktikum 3 lebih tepat dipahami sebagai **perbaikan hasil dalam kerangka Hartree–Fock**, bukan akurasi mutlak terhadap realitas eksperimen.

2. Hubungan Ukuran Basis Set dengan Energi Total

Dalam metode Hartree–Fock berbasis fungsi basis, orbital molekul dibangun sebagai kombinasi linear fungsi basis. Semakin banyak fungsi basis yang tersedia, semakin besar ruang matematis yang dapat digunakan untuk membentuk orbital molekul. Dengan ruang yang lebih fleksibel, sistem memiliki peluang lebih besar untuk menemukan fungsi gelombang Hartree–Fock dengan energi lebih rendah.

Secara konseptual:

basis set kecil

- ruang orbital terbatas
- fleksibilitas fungsi gelombang rendah
- energi total relatif lebih tinggi

basis set lebih besar

- ruang orbital lebih luas
- fleksibilitas fungsi gelombang meningkat
- energi total cenderung lebih rendah

Pola ini berkaitan dengan prinsip variasional. Dalam kerangka metode yang sama dan Hamiltonian yang sama, perluasan ruang fungsi basis umumnya memungkinkan energi menjadi lebih rendah atau setidaknya tidak lebih buruk. Namun, mahasiswa harus berhati-hati karena perbandingan harus dilakukan secara konsisten. Jika geometri berubah, jenis job berbeda, atau status SCF tidak konvergen, maka perubahan energi tidak dapat hanya dikaitkan dengan ukuran basis set.

Contoh analisis yang baik:

Pada molekul H_2O , energi total Hartree–Fock menurun ketika basis set diperbesar dari STO-3G ke 6-31G(d). Penurunan ini menunjukkan bahwa basis set yang lebih besar memberikan ruang matematis yang lebih fleksibel untuk merepresentasikan orbital molekul. Namun, hasil tersebut tetap berada dalam pendekatan Hartree–Fock sehingga belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap.

Contoh analisis yang kurang tepat:

Basis set 6-31G(d) paling benar karena energinya paling rendah.

Pernyataan kedua terlalu mutlak. Energi lebih rendah memang penting, tetapi tidak cukup untuk menyatakan “paling benar” tanpa membandingkan dengan data literatur, metode lain, geometri, sifat molekul, dan tujuan perhitungan.

3. Hubungan Jumlah Fungsi Basis dengan Waktu Komputasi

Jumlah fungsi basis berpengaruh langsung terhadap ukuran perhitungan. Dalam Hartree–Fock, bertambahnya jumlah fungsi basis memperbesar matriks Fock, matriks overlap, dan jumlah integral dua-elektron yang perlu dihitung. Akibatnya, waktu komputasi meningkat.

Secara sederhana:

jumlah fungsi basis meningkat
 → ukuran matriks meningkat
 → jumlah operasi matematis meningkat
 → waktu komputasi bertambah

Hubungan ini sangat penting dalam kimia komputasi karena sumber daya komputer tidak tak terbatas. Untuk molekul kecil seperti H_2 , peningkatan basis set mungkin tidak terasa berat. Akan tetapi, untuk molekul lebih besar seperti CH_4 , atau molekul organik besar, peningkatan basis set dapat menyebabkan waktu komputasi bertambah signifikan.

Dalam Praktikum 3, mahasiswa harus membandingkan grafik energi dan grafik waktu secara bersamaan. Grafik energi menunjukkan manfaat perluasan basis set, sedangkan grafik waktu menunjukkan biayanya. Jika energi turun banyak sementara waktu hanya naik sedikit, maka perluasan basis set dapat dianggap menguntungkan. Sebaliknya, jika energi hanya turun sangat kecil tetapi waktu meningkat besar, mahasiswa harus mempertanyakan apakah basis set tersebut efisien untuk tujuan praktikum.

Contoh analisis:

Pada CH_4 , waktu komputasi meningkat ketika basis set diperbesar. Peningkatan ini lebih terasa dibanding H_2 karena CH_4 memiliki jumlah atom dan elektron lebih banyak. Oleh karena itu, pemilihan basis set untuk CH_4 harus mempertimbangkan bukan hanya penurunan energi, tetapi juga kenaikan waktu komputasi.

4. Kompromi antara Akurasi dan Biaya Komputasi

Kompromi antara akurasi dan biaya komputasi adalah inti analisis Praktikum 3. Dalam ideal ilmiah, peneliti ingin hasil yang paling akurat. Namun, dalam praktik, akurasi selalu dibatasi oleh waktu, memori, perangkat keras, ukuran molekul, dan tujuan penelitian.

Basis set besar memberi deskripsi orbital lebih fleksibel. Akan tetapi, basis set besar juga membutuhkan biaya komputasi lebih tinggi. Oleh karena itu, pemilihan basis set harus menimbang pertanyaan berikut:

1. Apakah tujuan perhitungan hanya latihan konsep?
2. Apakah tujuan perhitungan membandingkan tren energi?
3. Apakah tujuan perhitungan memperoleh geometri yang cukup baik?
4. Apakah molekul cukup kecil untuk basis set besar?
5. Apakah waktu komputasi masih wajar?
6. Apakah metode Hartree–Fock sendiri sudah memadai untuk tujuan tersebut?

Untuk praktikum dasar, basis set seperti STO-3G dapat digunakan untuk memperkenalkan prosedur. Namun, untuk analisis geometri dan energi yang lebih bermakna, basis split-valence seperti 6-31G atau basis dengan fungsi polarisasi seperti 6-31G(d) lebih informatif. Untuk penelitian yang menuntut presisi lebih tinggi, perlu dipertimbangkan basis set yang lebih sistematis dan metode yang melampaui Hartree–Fock.

Contoh kesimpulan yang proporsional:

Basis set 6-31G(d) memberikan energi lebih rendah daripada 6-31G, tetapi membutuhkan waktu komputasi lebih lama. Untuk latihan praktikum dasar, 6-31G dapat dianggap cukup efisien karena memberi hasil lebih baik daripada basis minimal dengan biaya yang masih rendah. Namun, jika tujuan analisis adalah memahami pengaruh fungsi polarisasi pada molekul seperti H₂O atau HF, maka 6-31G(d) lebih tepat digunakan.

Analisis ini lebih baik daripada sekadar memilih basis set dengan energi paling rendah.

5. Analisis Molekul H₂

H₂ adalah sistem paling sederhana dalam Praktikum 3. Karena hanya terdiri atas dua atom hidrogen dan dua elektron, perhitungan H₂ sangat cepat. H₂ digunakan untuk memahami pola dasar pengaruh basis set terhadap energi total.

Dalam analisis H₂, mahasiswa perlu memperhatikan:

1. Energi total pada setiap basis set.
2. Jumlah fungsi basis.
3. Waktu komputasi.

4. Selisih energi antar basis set.
5. Panjang H–H jika optimasi dilakukan.

Karena H_2 sangat kecil, peningkatan basis set mungkin hanya menambah waktu secara kecil. Namun, energi tetap dapat berubah. Hal ini menunjukkan bahwa bahkan sistem paling sederhana pun dipengaruhi oleh representasi fungsi basis.

Contoh analisis:

Pada H_2 , energi total cenderung menurun ketika basis set diperbesar. Karena sistem ini sangat kecil, kenaikan waktu komputasi relatif rendah. Oleh karena itu, H_2 menjadi contoh yang baik untuk memperlihatkan prinsip bahwa basis set lebih besar memberi ruang orbital lebih fleksibel tanpa membebani komputasi secara signifikan.

Namun, mahasiswa juga harus memahami bahwa H_2 memiliki karakter khusus. Untuk H_2 pada jarak kesetimbangan, Hartree–Fock dapat memberi gambaran ikatan sederhana. Akan tetapi, pada pemutusan ikatan H_2 , Hartree–Fock satu determinan dapat mengalami keterbatasan serius. Hal ini menunjukkan bahwa kesederhanaan H_2 tidak berarti metode Hartree–Fock selalu sempurna untuk semua kondisi.

6. Analisis Molekul LiH

LiH memperkenalkan sistem diatomik heteronuklir. Berbeda dengan H_2 , LiH memiliki dua atom dengan sifat berbeda. Lithium memiliki elektron inti dan elektron valensi, sedangkan hidrogen hanya memiliki satu elektron. Ikatan Li–H memiliki karakter polar sehingga distribusi elektron tidak simetris.

Dalam analisis LiH, mahasiswa harus memperhatikan apakah basis set yang lebih besar memberi perubahan energi lebih nyata dibanding H_2 . Basis set kecil mungkin kurang fleksibel menggambarkan distribusi elektron pada atom berbeda ukuran. Jika energi turun cukup besar ketika basis diperbesar, mahasiswa dapat mengaitkannya dengan peningkatan fleksibilitas representasi orbital.

Contoh analisis:

Pada LiH, perubahan energi terhadap basis set menunjukkan bahwa molekul heteronuklir memerlukan representasi orbital yang lebih fleksibel dibanding H_2 . Karena Li dan H memiliki ukuran dan karakter elektronik berbeda, basis set yang lebih besar dapat membantu menggambarkan distribusi elektron yang tidak simetris.

LiH juga membantu mahasiswa memahami bahwa basis set harus sesuai dengan unsur yang dihitung. Basis yang terlalu kecil dapat memberi gambaran kasar, tetapi belum tentu cukup untuk mendeskripsikan polaritas ikatan secara baik.

7. Analisis Molekul HF

HF adalah molekul diatomik sangat polar. Atom F memiliki elektronegativitas tinggi dan elektron lebih banyak dibanding H. Oleh karena itu, basis set pada atom F menjadi sangat penting.

Dalam analisis HF, mahasiswa harus membedakan dua makna simbol HF:

HF sebagai metode = Hartree-Fock
 HF sebagai molekul = hidrogen fluorida

Agar tidak membingungkan, laporan sebaiknya menulis “molekul hidrogen fluorida” ketika membahas sistem, dan “metode Hartree-Fock” ketika membahas metode.

Pada HF, fungsi polarisasi dapat menjadi penting karena distribusi elektron di sekitar F dapat mengalami distorsi dalam ikatan. Basis seperti 6-31G(d) memungkinkan atom berat seperti F memiliki fungsi tambahan yang membantu menggambarkan polarisasi kerapatan elektron.

Contoh analisis:

Pada molekul hidrogen fluorida, energi total menurun ketika basis set diperbesar. Penambahan fungsi polarisasi pada 6-31G(d) dapat memberikan deskripsi yang lebih fleksibel terhadap distribusi elektron pada atom F. Namun, hasil tetap berada dalam kerangka Hartree-Fock sehingga belum mencakup korelasi elektron dinamis secara lengkap.

Analisis HF penting karena menunjukkan bahwa basis set bukan hanya jumlah fungsi, tetapi juga jenis fungsi. Fungsi polarisasi dapat memiliki arti kimia yang penting pada ikatan polar.

8. Analisis Molekul H₂O

H₂O adalah molekul poliatomik bengkok dengan pasangan elektron bebas pada atom O. Molekul ini sangat baik untuk melihat pengaruh basis set terhadap energi total, waktu komputasi, dan geometri jika optimasi dilakukan.

Dalam analisis H₂O, mahasiswa harus memperhatikan:

1. Energi total untuk setiap basis set.
2. Jumlah fungsi basis.
3. Waktu komputasi.
4. Panjang O-H jika optimasi dilakukan.
5. Sudut H-O-H jika optimasi dilakukan.
6. Pengaruh fungsi polarisasi.

H₂O memiliki pasangan elektron bebas, sehingga distribusi elektron di sekitar O tidak hanya terlibat dalam ikatan O–H, tetapi juga dalam bentuk bengkok molekul. Fungsi basis yang lebih fleksibel dapat membantu menggambarkan distribusi elektron tersebut.

Contoh analisis:

Pada H₂O, energi total menurun ketika basis set diperbesar. Penambahan fungsi polarisasi dapat lebih bermakna dibanding pada H₂ karena H₂O memiliki atom O dengan pasangan elektron bebas dan geometri bengkok. Oleh karena itu, basis set seperti 6-31G(d) dapat memberi deskripsi yang lebih baik terhadap distribusi elektron di sekitar atom O, meskipun biaya komputasinya meningkat.

H₂O juga mengajarkan bahwa waktu komputasi meningkat dengan bertambahnya ukuran sistem. Dibanding H₂ dan HF, H₂O memiliki lebih banyak atom dan elektron, sehingga basis set besar memberi peningkatan biaya lebih jelas.

9. Analisis Molekul CH₄

CH₄ adalah molekul tetrahedral dengan simetri tinggi. Molekul ini memiliki satu atom C dan empat atom H. Dalam Praktikum 3, CH₄ berfungsi sebagai contoh molekul poliatomik yang lebih besar daripada H₂O dari sisi jumlah atom, meskipun strukturnya simetris.

Pada CH₄, mahasiswa harus memperhatikan:

1. Energi total setiap basis set.
2. Jumlah fungsi basis.
3. Waktu komputasi.
4. Panjang C–H jika optimasi dilakukan.
5. Sudut H–C–H jika optimasi dilakukan.
6. Kesetaraan ikatan C–H.

Karena CH₄ memiliki empat ikatan C–H yang setara, hasil optimasi yang baik seharusnya menunjukkan panjang C–H relatif seragam. Jika terdapat perbedaan besar antar ikatan C–H tanpa alasan, mahasiswa perlu memeriksa struktur awal, status optimasi, atau data geometri.

Dalam analisis waktu komputasi, CH₄ sangat berguna karena peningkatan jumlah fungsi basis lebih terasa dibanding H₂. Semakin besar basis set, semakin besar biaya komputasi. Dengan demikian, CH₄ membantu mahasiswa memahami bahwa pilihan basis set yang masih ringan untuk H₂ belum tentu ringan untuk molekul lebih besar.

Contoh analisis:

Pada CH₄, energi total menurun ketika basis set diperbesar, tetapi waktu komputasi juga meningkat lebih nyata dibanding H₂. Hal ini menunjukkan bahwa biaya komputasi tidak hanya bergantung pada basis set, tetapi juga pada ukuran

molekul. Untuk molekul yang lebih besar, pemilihan basis set harus lebih hati-hati agar biaya komputasi tetap wajar.

10. Analisis Selisih Energi Antar Basis Set

Selisih energi antar basis set merupakan alat penting untuk menilai apakah penambahan basis masih memberi perbaikan besar. Selisih energi dihitung sebagai:

$$\Delta E = E_{\text{basis\_saat\_ini}} - E_{\text{basis\_sebelumnya}}$$

Jika energi menurun, nilai ΔE negatif. Untuk membaca besar perubahan, digunakan nilai mutlak:

$$|\Delta E| = |E_{\text{basis\_saat\_ini}} - E_{\text{basis\_sebelumnya}}|$$

Interpretasi selisih energi:

Kondisi	Makna
`	ΔE
`	ΔE
`	ΔE
`	ΔE

Mahasiswa harus membandingkan $|\Delta E|$ dengan waktu komputasi. Jika $|\Delta E|$ kecil tetapi waktu meningkat besar, basis set tambahan mungkin tidak efisien untuk tujuan praktikum dasar.

Contoh analisis:

Perubahan energi dari STO-3G ke 3-21G lebih besar daripada perubahan dari 6-31G ke 6-31G(d). Hal ini menunjukkan bahwa perluasan dari basis minimal ke basis split-valence memberi perbaikan energi yang besar, sedangkan penambahan fungsi polarisasi memberi perbaikan tambahan yang lebih kecil. Meskipun demikian, fungsi polarisasi tetap penting untuk molekul tertentu, terutama yang memiliki distribusi elektron tidak simetris.

11. Analisis Konvergensi Basis Set Sederhana

Konvergensi basis set sederhana adalah kecenderungan hasil perhitungan menjadi relatif stabil ketika ukuran basis set diperbesar. Dalam Praktikum 3, konvergensi basis set dianalisis melalui:

1. Grafik energi terhadap jumlah fungsi basis.
2. Tabel selisih energi antar basis set.
3. Nilai $|\Delta E|$.
4. Perbandingan dengan waktu komputasi.

Grafik energi yang mulai mendatar menunjukkan bahwa penambahan fungsi basis menghasilkan perubahan energi yang makin kecil. Namun, mahasiswa harus memahami bahwa ini hanya konvergensi praktikum sederhana, bukan ekstrapolasi basis set lengkap.

Contoh narasi:

Energi total H_2O menunjukkan kecenderungan menurun ketika basis set diperbesar. Namun, penurunan energi dari basis set menengah ke basis lebih besar lebih kecil dibanding penurunan dari basis minimal. Pola ini menunjukkan kecenderungan konvergensi basis set sederhana. Meskipun demikian, hasil tersebut tetap merupakan batas dalam kerangka Hartree-Fock, bukan energi eksak molekul.

Analisis ini menunjukkan keseimbangan antara pemahaman prinsip variasional dan kesadaran terhadap keterbatasan metode.

12. Hubungan Akurasi dengan Keterbatasan Hartree-Fock

Dalam Praktikum 3, mahasiswa harus membedakan dua sumber kesalahan:

1. **Kesalahan basis set.**
2. **Kesalahan metode Hartree-Fock.**

Kesalahan basis set muncul karena orbital molekul direpresentasikan dalam ruang fungsi yang terbatas. Basis set lebih besar dapat mengurangi kesalahan ini. Kesalahan metode muncul karena Hartree-Fock menggunakan pendekatan medan rata-rata dan satu determinan Slater, sehingga korelasi elektron dinamis belum dimasukkan secara lengkap.

Dengan demikian:

memperbesar basis set
 → mengurangi keterbatasan representasi orbital
 → tetapi tidak menghilangkan keterbatasan Hartree-Fock

Ini adalah poin analisis yang sangat penting. Mahasiswa tidak boleh menyimpulkan bahwa basis set terbesar dalam praktikum menghasilkan kebenaran final. Basis set besar hanya memperbaiki hasil dalam kerangka metode yang digunakan. Jika metode memiliki keterbatasan, maka hasil tetap terbatas.

Contoh analisis kritis:

Walaupun 6-31G(d) menghasilkan energi lebih rendah daripada STO-3G, hasil tersebut tidak boleh dianggap sebagai energi eksak. Penurunan energi menunjukkan perbaikan representasi basis, tetapi Hartree-Fock tetap belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Oleh karena itu, untuk perhitungan yang menuntut akurasi lebih tinggi, metode pasca-Hartree-Fock atau DFT perlu dipertimbangkan.

13. Analisis Efisiensi Basis Set

Efisiensi basis set adalah ukuran praktis untuk menilai apakah suatu basis set memberikan hasil yang cukup baik dengan biaya komputasi yang masih wajar. Dalam Praktikum 3, efisiensi dapat dinilai melalui kombinasi:

1. Energi total.
2. Selisih energi terhadap basis sebelumnya.
3. Jumlah fungsi basis.
4. Waktu komputasi.
5. Kebutuhan analisis kimia.

Basis set yang efisien bukan selalu basis set tercepat. Basis tercepat mungkin terlalu kasar. Basis set efisien juga bukan selalu basis dengan energi paling rendah. Basis dengan energi paling rendah mungkin terlalu mahal untuk tujuan pembelajaran.

Contoh pertimbangan:

Tujuan	Basis Set yang Mungkin Cukup
Latihan cepat prosedur HF	STO-3G atau 3-21G
Analisis tren energi sederhana	3-21G atau 6-31G
Analisis geometri lebih baik	6-31G atau 6-31G(d)
Molekul polar atau pasangan bebas	Basis dengan fungsi polarisasi lebih disarankan
Riset lebih serius	Perlu basis dan metode yang divalidasi literatur

Dengan tabel seperti ini, mahasiswa belajar bahwa pemilihan basis set bergantung pada tujuan, bukan hanya daftar baku.

14. Contoh Analisis Efisiensi pada Data Praktikum

Contoh analisis efisiensi dapat ditulis sebagai berikut:

Berdasarkan tabel energi dan waktu, STO-3G memiliki waktu komputasi paling kecil, tetapi energinya relatif lebih tinggi dibanding basis set lain. Basis 6-31G menghasilkan energi lebih rendah dengan kenaikan waktu yang masih wajar, sehingga dapat dianggap efisien untuk latihan analisis energi. Basis 6-31G(d) memberikan energi lebih rendah lagi dan menambahkan fungsi polarisasi, tetapi membutuhkan waktu lebih lama. Oleh karena itu, 6-31G(d) lebih tepat digunakan ketika pembahasan membutuhkan deskripsi distribusi elektron yang lebih fleksibel, sedangkan 6-31G dapat dipilih untuk latihan cepat dengan kompromi yang baik.

Analisis tersebut tidak menghakimi satu basis set sebagai selalu terbaik. Ia menempatkan setiap basis set sesuai tujuan.

15. Analisis Perbandingan Single Point dan Optimasi Geometri

Jika mahasiswa menjalankan single point energy dan optimasi geometri, keduanya harus dianalisis secara berbeda.

Single point energy menjawab:

Bagaimana energi berubah jika basis set diubah pada geometri yang sama?

Optimasi geometri menjawab:

Bagaimana geometri optimum berubah jika basis set diubah?

Jika mahasiswa membandingkan energi dari single point dan optimasi tanpa membedakan jenis job, analisis menjadi tidak valid. Energi single point pada geometri awal tidak sama maknanya dengan energi hasil optimasi. Dalam optimasi, energi berubah karena basis set dan geometri. Dalam single point, energi berubah terutama karena basis set jika geometri dijaga sama.

Contoh analisis yang benar:

Perbandingan energi antar basis set dilakukan menggunakan data single point energy pada geometri yang sama. Dengan demikian, perbedaan energi terutama dikaitkan dengan perbedaan basis set. Sementara itu, data optimasi geometri digunakan untuk melihat pengaruh basis set terhadap panjang ikatan dan sudut ikatan.

Pemisahan ini penting agar mahasiswa tidak mencampur dua jenis data yang berbeda makna.

16. Analisis Validitas Data

Sebelum membuat kesimpulan, mahasiswa harus memvalidasi data. Validitas data meliputi:

1. Status SCF harus konvergen.
2. Basis set harus benar.
3. Molekul harus benar.
4. Muatan dan multiplicity harus benar.
5. Jenis job harus jelas.
6. Energi harus berasal dari iterasi akhir.
7. Waktu komputasi harus dicatat dari sumber yang sama.
8. Data tidak boleh salah salin.
9. Geometri harus sama jika membandingkan single point.
10. Output harus disimpan.

Jika salah satu syarat ini tidak terpenuhi, analisis harus diberi catatan. Data yang tidak valid tidak boleh digunakan untuk membuat kesimpulan utama.

Contoh catatan:

Data HF/6-31G(d) untuk LiH tidak dimasukkan dalam grafik karena SCF tidak mencapai konvergensi. Oleh karena itu, analisis basis set LiH hanya menggunakan data yang konvergen.

Pernyataan seperti ini lebih ilmiah daripada menyembunyikan data bermasalah.

17. Kesalahan Analisis yang Harus Dihindari

Beberapa kesalahan umum dalam analisis Praktikum 3 adalah:

Kesalahan	Koreksi
Menganggap energi total antar molekul dapat dibandingkan langsung	Bandingkan energi antar basis set pada molekul yang sama
Menganggap basis set terbesar selalu terbaik	Nilai juga waktu komputasi dan tujuan perhitungan
Mengabaikan status SCF	Gunakan hanya data yang konvergen
Mencampur SP dan optimasi	Pisahkan makna kedua jenis job
Menganggap Hartree–Fock eksak jika basis besar	Hartree–Fock tetap belum memasukkan korelasi lengkap
Mengabaikan jumlah fungsi basis	Jumlah fungsi basis penting untuk memahami biaya
Membaca grafik tanpa tabel	Grafik harus diverifikasi dengan data numerik
Menganggap waktu komputasi mutlak universal	Waktu dipengaruhi hardware dan platform
Tidak menyebut satuan energi	Energi harus ditulis dalam Hartree atau satuan yang dikonversi jelas

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari agar laporan praktikum tidak hanya rapi secara tampilan, tetapi juga benar secara metodologis.

18. Format Analisis dalam Laporan

Bagian analisis dalam laporan Praktikum 3 dapat disusun sebagai berikut:

6. Analisis Hasil

6.1 Validasi Data

Menjelaskan status SCF, basis set, molekul, dan jenis job.

6.2 Analisis Energi Total

Membandingkan energi total antar basis set pada molekul yang sama.

6.3 Analisis Selisih Energi

Membahas perubahan energi dari satu basis ke basis berikutnya.

6.4 Analisis Waktu Komputasi

Membahas hubungan jumlah fungsi basis dan waktu komputasi.

6.5 Analisis Efisiensi Basis Set

Menilai basis set yang memberi kompromi terbaik.

6.6 Keterbatasan Hartree-Fock

Menjelaskan bahwa basis set besar tidak menghilangkan keterbatasan korelasi elektron.

Struktur seperti ini membantu mahasiswa menulis analisis secara runtut. Analisis tidak boleh berupa kumpulan tabel tanpa narasi. Setiap tabel harus diikuti pembahasan. Setiap grafik harus diberi interpretasi.

19. Contoh Analisis Terpadu

Berikut contoh analisis terpadu yang dapat dijadikan pola penulisan. Angka harus disesuaikan dengan hasil praktikum masing-masing.

Hasil perhitungan Hartree-Fock menunjukkan bahwa energi total setiap molekul berubah ketika basis set diperbesar. Pada molekul H_2 , penurunan energi terjadi dengan kenaikan waktu komputasi yang relatif kecil karena ukuran molekul sangat sederhana. Pada molekul yang lebih besar seperti H_2O dan CH_4 , peningkatan basis set menyebabkan kenaikan waktu komputasi yang lebih nyata.

Grafik energi terhadap jumlah fungsi basis menunjukkan kecenderungan energi menurun ketika jumlah fungsi basis meningkat. Hal ini sesuai dengan prinsip variasional bahwa ruang fungsi yang lebih luas memberikan fleksibilitas lebih besar bagi orbital molekul. Namun, penurunan energi dari basis set menengah ke basis yang lebih besar cenderung lebih kecil dibanding penurunan dari basis minimal. Pola ini menunjukkan kecenderungan konvergensi basis set sederhana.

Grafik waktu komputasi menunjukkan bahwa basis set yang lebih besar memerlukan waktu lebih lama. Oleh karena itu, pemilihan basis set harus mempertimbangkan kompromi antara energi dan biaya. Untuk latihan cepat, basis set menengah dapat dianggap efisien. Untuk pembahasan yang membutuhkan fungsi polarisasi, 6-31G(d) lebih tepat digunakan. Namun, seluruh hasil tetap berada dalam kerangka Hartree-Fock, sehingga belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap.

Contoh ini menunjukkan bahwa analisis menghubungkan energi, basis set, waktu, prinsip variasional, dan keterbatasan Hartree-Fock.

20. Implikasi Analisis terhadap Pembelajaran Kimia Komputasi

Analisis Praktikum 3 memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa memahami bahwa pilihan basis set memengaruhi hasil perhitungan. Kedua, mahasiswa memahami bahwa energi total tidak boleh dibaca tanpa konteks metode dan basis. Ketiga, mahasiswa belajar menilai biaya komputasi sebagai bagian dari keputusan ilmiah. Keempat, mahasiswa memahami bahwa perhitungan kimia kuantum selalu melibatkan kompromi. Kelima, mahasiswa mulai melihat mengapa metode yang lebih lanjut seperti DFT, MP2, dan coupled cluster dikembangkan.

Analisis ini juga menyiapkan mahasiswa untuk praktikum berikutnya. Ketika mahasiswa mempelajari DFT, mereka akan lebih siap memahami bahwa pemilihan fungsional dan basis set sama-sama penting. Ketika mempelajari HOMO-LUMO, mereka akan memahami bahwa bentuk dan energi orbital bergantung pada metode dan basis. Ketika mempelajari momen dipol dan spektrum IR, mereka akan menyadari bahwa kualitas geometri dan basis set memengaruhi hasil.

21. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Subbab 6.9 telah membahas cara menilai kompromi antara akurasi, ukuran basis set, dan waktu komputasi. Mahasiswa telah diarahkan untuk membaca tabel energi total, grafik energi vs basis set, grafik waktu komputasi, selisih energi antar basis set, dan ringkasan basis set efisien secara kritis.

Subbab berikutnya, 6.10, akan memuat pertanyaan diskusi. Pertanyaan tersebut akan menguji pemahaman mahasiswa tentang mengapa basis set lebih besar umumnya menghasilkan energi lebih rendah, mengapa Hartree–Fock belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap, apa konsekuensi basis set terlalu kecil, dan bagaimana hubungan ukuran basis set dengan waktu komputasi.

6.10 Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 3 berfungsi untuk menguji pemahaman mahasiswa terhadap hubungan antara **metode Hartree–Fock**, **fungsi basis**, **energi total**, dan **biaya komputasi**. Setelah mahasiswa menjalankan perhitungan dengan beberapa basis set, membuat tabel energi total, membuat grafik energi terhadap ukuran basis set, menghitung selisih energi, dan membandingkan waktu komputasi, mereka harus mampu menjelaskan makna konseptual di balik data tersebut.

Pertanyaan diskusi tidak boleh dijawab dengan kalimat pendek yang hanya mengulang hasil praktikum. Mahasiswa harus menunjukkan pemahaman bahwa energi total dalam Hartree–Fock bukan angka yang muncul begitu saja, melainkan hasil dari model matematis tertentu. Basis set bukan sekadar menu pilihan dalam software, melainkan ruang fungsi yang menentukan bagaimana orbital molekul direpresentasikan. Waktu komputasi bukan sekadar gangguan teknis, melainkan konsekuensi langsung dari ukuran masalah matematika yang harus diselesaikan komputer.

Pertanyaan diskusi pada Praktikum 3 terdiri atas empat pertanyaan utama:

1. Mengapa basis set lebih besar umumnya menghasilkan energi lebih rendah?
2. Mengapa Hartree–Fock belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap?
3. Apa konsekuensi penggunaan basis set terlalu kecil?
4. Apa hubungan ukuran basis set dengan waktu komputasi?

Keempat pertanyaan tersebut saling berkaitan. Basis set lebih besar memberi fleksibilitas lebih luas bagi orbital molekul sehingga energi Hartree–Fock dapat turun. Akan tetapi, energi yang lebih rendah dalam Hartree–Fock tidak berarti energi eksak karena korelasi elektron belum dimasukkan secara lengkap. Basis set terlalu kecil membuat orbital tidak cukup fleksibel, sehingga energi, geometri, dan sifat molekul dapat kurang baik. Sementara itu, basis set yang lebih besar meningkatkan jumlah fungsi basis, ukuran matriks, jumlah integral, dan waktu komputasi. Dengan demikian, pertanyaan diskusi ini melatih mahasiswa memahami kompromi metodologis dalam kimia komputasi.

1. Mengapa Basis Set Lebih Besar Umumnya Menghasilkan Energi Lebih Rendah?

Basis set lebih besar umumnya menghasilkan energi lebih rendah karena basis set yang lebih besar menyediakan ruang matematis yang lebih luas untuk merepresentasikan orbital molekul. Dalam metode Hartree–Fock, orbital molekul tidak dihitung sebagai fungsi eksak tak terbatas, tetapi didekati sebagai kombinasi linear dari fungsi-fungsi basis.

Secara konseptual, orbital molekul ditulis sebagai:

$$\psi_i = c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + c_3\chi_3 + \dots + c_n\chi_n$$

dengan ψ_i sebagai orbital molekul, χ sebagai fungsi basis, dan c sebagai koefisien yang dicari melalui prosedur SCF. Jika jumlah fungsi basis sedikit, bentuk orbital yang dapat dibangun juga terbatas. Jika jumlah fungsi basis bertambah, orbital memiliki lebih banyak kebebasan untuk menyesuaikan distribusi elektron dalam molekul.

Prinsip ini berkaitan dengan **prinsip variasional**. Dalam mekanika kuantum, energi yang dihitung dari fungsi gelombang percobaan tidak akan lebih rendah daripada energi keadaan dasar eksak untuk Hamiltonian yang sama. Ketika ruang fungsi percobaan diperbesar, peluang menemukan fungsi gelombang yang lebih baik meningkat. Oleh karena itu, dalam metode dan geometri yang sama, basis set lebih besar umumnya menghasilkan energi Hartree–Fock yang lebih rendah atau mendekati batas tertentu.

Secara sederhana:

basis set kecil
→ orbital kurang fleksibel
→ energi relatif tinggi

basis set lebih besar

- orbital lebih fleksibel
- energi cenderung lebih rendah

Namun, mahasiswa harus berhati-hati. Pernyataan ini berlaku jika perbandingan dilakukan secara konsisten: molekul sama, geometri sama, metode sama, muatan sama, multiplicity sama, dan SCF konvergen. Jika geometri berbeda atau job yang dibandingkan tidak sama, energi tidak dapat ditafsirkan hanya sebagai akibat perubahan basis set.

Jawaban yang baik:

Basis set lebih besar umumnya menghasilkan energi lebih rendah karena menyediakan ruang fungsi yang lebih luas untuk membangun orbital molekul. Dalam kerangka Hartree-Fock, orbital molekul ditulis sebagai kombinasi linear fungsi basis. Jika jumlah fungsi basis bertambah, fungsi gelombang Hartree-Fock menjadi lebih fleksibel sehingga dapat mendekati energi minimum dalam ruang Hartree-Fock dengan lebih baik. Hal ini sesuai dengan prinsip variasional. Namun, energi yang lebih rendah tersebut tetap berada dalam batas metode Hartree-Fock dan belum tentu merupakan energi eksak molekul.

Jawaban yang kurang tepat:

Basis set besar lebih baik karena angkanya lebih kecil.

Jawaban tersebut terlalu dangkal karena tidak menjelaskan prinsip variasional, fleksibilitas orbital, dan batas metode.

2. Mengapa Hartree-Fock Belum Memasukkan Korelasi Elektron secara Lengkap?

Hartree-Fock belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap karena metode ini memperlakukan gerak elektron melalui pendekatan medan rata-rata. Dalam Hartree-Fock, setiap elektron dianggap bergerak dalam medan efektif yang dibentuk oleh inti dan distribusi rata-rata elektron lain. Pendekatan ini sangat berguna karena menyederhanakan persoalan banyak elektron menjadi persoalan orbital satu elektron efektif, tetapi penyederhanaan tersebut memiliki konsekuensi.

Dalam sistem elektron nyata, elektron-elektron saling menghindari secara dinamis karena tolakan Coulomb. Posisi sesaat satu elektron memengaruhi kemungkinan posisi elektron lain. Gerak saling menghindari ini disebut **korelasi elektron**. Hartree-Fock menangani sebagian efek penting melalui suku exchange yang muncul dari antisimetri fungsi gelombang determinan Slater. Akan tetapi, Hartree-Fock tidak menangkap seluruh korelasi dinamis, terutama korelasi antara elektron dengan spin berlawanan.

Secara ringkas:

Aspek	Perlakuan dalam Hartree-Fock
Tolakan Coulomb rata-rata	Dimasukkan
Exchange untuk elektron spin sama	Dimasukkan melalui determinan Slater

Korelasi dinamis elektron	Belum lengkap
Gerak sesaat elektron saling menghindar	Tidak direpresentasikan penuh

Inilah sebabnya energi Hartree–Fock, bahkan dengan basis set sangat besar, tetap tidak mencapai energi eksak. Jika basis set diperbesar sampai mendekati batas Hartree–Fock, yang dicapai adalah **Hartree–Fock limit**, bukan energi eksak nonrelativistik molekul. Selisih antara energi eksak dan energi Hartree–Fock limit disebut energi korelasi.

Secara konseptual:

$$E_{\text{korelasi}} = E_{\text{eksak}} - E_{\text{HF}}$$

Karena energi eksak biasanya lebih rendah daripada energi Hartree–Fock, energi korelasi bernilai negatif.

Jawaban yang baik:

Hartree–Fock belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap karena metode ini menggunakan pendekatan medan rata-rata dan satu determinan Slater. Elektron dalam Hartree–Fock bergerak dalam medan efektif rata-rata elektron lain, bukan mengikuti gerak sesaat elektron lain secara penuh. Hartree–Fock memasukkan exchange akibat antisimetri fungsi gelombang, tetapi belum memasukkan korelasi dinamis elektron secara lengkap. Karena itu, meskipun basis set diperbesar, hasilnya hanya mendekati batas Hartree–Fock, bukan energi eksak molekul.

Jawaban yang kurang tepat:

Hartree–Fock tidak akurat karena metodenya lama.

Jawaban tersebut tidak ilmiah. Keterbatasan Hartree–Fock bukan karena usianya, tetapi karena struktur teorinya: medan rata-rata, satu determinan, dan korelasi elektron yang belum lengkap.

3. Apa Konsekuensi Penggunaan Basis Set Terlalu Kecil?

Penggunaan basis set terlalu kecil menyebabkan orbital molekul tidak memiliki fleksibilitas yang cukup untuk merepresentasikan distribusi elektron secara memadai. Akibatnya, energi total dapat terlalu tinggi, panjang ikatan dapat kurang akurat, sudut ikatan dapat menyimpang, dan sifat molekul lain seperti momen dipol, muatan parsial, frekuensi vibrasi, atau energi relatif dapat kurang baik.

Basis set kecil seperti STO-3G berguna untuk pembelajaran awal karena cepat dan ringan. Namun, basis set minimal hanya menyediakan representasi orbital yang sangat terbatas. Untuk molekul sederhana, hasilnya mungkin cukup memberi gambaran kualitatif. Untuk molekul polar, molekul dengan pasangan elektron bebas, anion, keadaan tereksitasi, atau interaksi lemah, basis set terlalu kecil dapat menghasilkan deskripsi yang kurang memadai.

Konsekuensi penggunaan basis set terlalu kecil dapat diringkas sebagai berikut:

Konsekuensi	Penjelasan
Energi total relatif tinggi	Orbital tidak cukup fleksibel untuk menurunkan energi
Geometri kurang baik	Panjang ikatan dan sudut ikatan dapat menyimpang
Distribusi elektron kasar	Polaritas dan pasangan elektron bebas kurang tergambarkan
Sifat molekul kurang akurat	Momen dipol, muatan, dan frekuensi dapat menyimpang
Kesimpulan dapat menyesatkan	Terutama jika hasil dianggap sebagai prediksi presisi
Perbandingan basis set terbatas	Basis terlalu kecil hanya cocok sebagai titik awal

Contoh konkret pada H_2O : basis set terlalu kecil mungkin memberi gambaran bahwa molekul berbentuk bengkok, tetapi panjang O–H, sudut H–O–H, dan distribusi elektron di sekitar atom O belum tentu baik. Pada HF, basis set kecil mungkin kurang fleksibel menggambarkan kerapatan elektron pada atom F yang sangat elektronegatif. Pada CH_4 , basis set kecil dapat memberi bentuk tetrahedral secara kualitatif, tetapi energi total dan panjang C–H dapat kurang baik.

Jawaban yang baik:

Basis set terlalu kecil membatasi fleksibilitas orbital molekul. Akibatnya, energi total dapat terlalu tinggi, panjang ikatan dan sudut ikatan dapat kurang akurat, dan distribusi elektron dapat digambarkan terlalu kasar. Basis set kecil berguna untuk latihan cepat, tetapi tidak boleh digunakan untuk klaim presisi tinggi tanpa validasi. Untuk molekul polar, molekul dengan pasangan elektron bebas, atau sistem yang memerlukan deskripsi elektron lebih fleksibel, basis set yang terlalu kecil dapat menghasilkan interpretasi kimia yang menyesatkan.

Jawaban yang kurang tepat:

Basis set kecil salah dan tidak boleh dipakai.

Jawaban tersebut juga tidak tepat. Basis set kecil tidak selalu “salah”. Ia berguna untuk pembelajaran, perhitungan awal, atau eksplorasi cepat. Yang salah adalah menggunakan basis set terlalu kecil untuk membuat klaim akurasi tinggi tanpa menyadari keterbatasannya.

4. Apa Hubungan Ukuran Basis Set dengan Waktu Komputasi?

Ukuran basis set berhubungan langsung dengan waktu komputasi karena jumlah fungsi basis menentukan ukuran masalah matematika yang harus diselesaikan. Dalam Hartree–Fock, fungsi basis digunakan untuk membangun matriks Fock, matriks overlap, dan integral dua-elektron. Jika jumlah fungsi basis meningkat, ukuran matriks bertambah dan jumlah operasi matematis meningkat.

Secara sederhana:

basis set lebih besar
→ jumlah fungsi basis lebih banyak

- matriks lebih besar
- integral lebih banyak
- iterasi SCF lebih mahal
- waktu komputasi meningkat

Hubungan ini sangat penting karena kimia komputasi selalu menghadapi batas sumber daya. Perhitungan dengan basis set besar pada molekul kecil seperti H_2 mungkin masih cepat. Namun, pada molekul yang lebih besar, peningkatan basis set dapat menyebabkan waktu komputasi bertambah signifikan. Karena itu, basis set yang praktis untuk H_2 belum tentu praktis untuk molekul organik besar.

Mahasiswa juga harus memahami bahwa waktu komputasi tidak hanya bergantung pada basis set. Faktor lain yang berpengaruh meliputi jumlah atom, jumlah elektron, jenis job, jumlah iterasi SCF, konvergensi, hardware, server, dan software yang digunakan. Namun, dalam Praktikum 3, basis set menjadi variabel utama yang diamati.

Jawaban yang baik:

Ukuran basis set berhubungan dengan waktu komputasi karena basis set yang lebih besar memiliki jumlah fungsi basis lebih banyak. Jumlah fungsi basis yang lebih besar memperbesar matriks Fock dan jumlah integral dua-elektron yang harus dihitung dalam prosedur SCF. Akibatnya, waktu komputasi meningkat. Namun, waktu komputasi juga dipengaruhi oleh ukuran molekul, jumlah elektron, jenis job, hardware, dan status konvergensi.

Jawaban yang kurang tepat:

Basis set besar lebih lama karena filenya besar.

Ukuran file bisa ikut bertambah, tetapi penyebab utama waktu komputasi lebih lama adalah bertambahnya ukuran perhitungan matematis, bukan sekadar ukuran file.

5. Contoh Jawaban Diskusi Terpadu

Berikut contoh jawaban terpadu yang menghubungkan empat pertanyaan utama. Mahasiswa dapat menggunakan pola ini, tetapi harus menyesuaikannya dengan data praktikum masing-masing.

Basis set lebih besar umumnya menghasilkan energi lebih rendah karena memberikan fleksibilitas lebih besar dalam membangun orbital molekul. Dalam Hartree-Fock, orbital molekul dinyatakan sebagai kombinasi linear fungsi basis. Semakin banyak fungsi basis, semakin luas ruang matematis yang tersedia untuk mendekati fungsi gelombang terbaik dalam kerangka Hartree-Fock. Hal ini sesuai dengan prinsip variasional.

Namun, energi yang lebih rendah tidak berarti Hartree-Fock sudah menghasilkan energi eksak. Hartree-Fock menggunakan pendekatan medan rata-rata dan satu determinan Slater. Metode ini memasukkan exchange, tetapi belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Karena itu, memperbesar basis set

hanya membawa hasil menuju batas Hartree-Fock, bukan menuju energi eksak sepenuhnya.

Jika basis set terlalu kecil, orbital molekul menjadi kurang fleksibel. Akibatnya, energi total dapat terlalu tinggi, panjang ikatan dan sudut ikatan dapat kurang akurat, serta distribusi elektron dapat digambarkan terlalu kasar. Basis set kecil berguna untuk latihan cepat, tetapi tidak cukup untuk klaim presisi tinggi.

Ukuran basis set juga berhubungan dengan waktu komputasi. Basis set lebih besar memiliki jumlah fungsi basis lebih banyak, sehingga matriks dan integral yang harus dihitung dalam prosedur SCF menjadi lebih besar. Akibatnya, waktu komputasi meningkat. Oleh karena itu, pemilihan basis set harus mempertimbangkan kompromi antara kualitas hasil dan biaya komputasi.

Jawaban tersebut baik karena tidak hanya menyebut fakta, tetapi menjelaskan hubungan sebab-akibat antara teori, data, dan konsekuensi praktis.

6. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik

Jawaban diskusi yang baik harus memenuhi beberapa kriteria berikut.

Kriteria	Penjelasan
Konseptual	Menjelaskan makna basis set, Hartree-Fock, energi, dan waktu komputasi
Argumentatif	Menunjukkan hubungan sebab-akibat, bukan hanya definisi
Berbasis data	Mengacu pada tabel energi, grafik energi, grafik waktu, dan selisih energi
Kritis	Menyebut keterbatasan Hartree-Fock dan basis set
Proporsional	Tidak menyatakan basis set terbesar selalu paling benar
Metodologis	Membedakan pengaruh basis set, metode, geometri, dan jenis job
Komunikatif	Menggunakan bahasa ilmiah yang jelas dan tidak membingungkan

Jawaban yang hanya berbunyi “basis set besar lebih akurat” belum cukup. Jawaban yang baik harus menjelaskan **mengapa** basis set lebih besar dapat memberi energi lebih rendah, **apa batas pernyataan tersebut**, dan **bagaimana konsekuensinya terhadap waktu komputasi**.

7. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi

Rubrik berikut dapat digunakan untuk menilai jawaban mahasiswa.

Skor	Kriteria
4	Jawaban benar, lengkap, argumentatif, mengaitkan teori Hartree-Fock, basis set, data praktikum, dan keterbatasan metode
3	Jawaban benar tetapi belum sepenuhnya mengaitkan teori dengan data praktikum
2	Jawaban sebagian benar tetapi masih dangkal atau ada kekurangan konsep

1	Jawaban sangat umum, hanya mengulang istilah, atau tidak menjelaskan alasan
0	Jawaban salah, kosong, atau tidak relevan

Penerapan rubrik:

- Untuk pertanyaan basis set lebih besar, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan prinsip variasional, fleksibilitas orbital, dan batas Hartree–Fock.
- Untuk pertanyaan korelasi elektron, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan medan rata-rata, exchange, satu determinan, dan korelasi dinamis.
- Untuk pertanyaan basis set terlalu kecil, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan dampak pada energi, geometri, distribusi elektron, dan validitas kesimpulan.
- Untuk pertanyaan waktu komputasi, skor 4 diberikan jika mahasiswa menjelaskan jumlah fungsi basis, ukuran matriks, integral, SCF, dan faktor lain seperti ukuran molekul serta hardware.

Rubrik ini membantu dosen menilai jawaban secara konsisten dan membantu mahasiswa memahami standar jawaban yang diharapkan.

8. Pertanyaan Pengayaan untuk Diskusi Lanjutan

Selain empat pertanyaan utama, dosen dapat memberikan pertanyaan pengayaan berikut untuk memperluas diskusi:

1. Apa perbedaan basis set minimal, split-valence, polarisasi, dan difus?
2. Mengapa fungsi polarisasi penting untuk molekul seperti H_2O dan HF?
3. Mengapa fungsi difus penting untuk anion atau keadaan tereksitasi?
4. Apa perbedaan Hartree–Fock limit dan energi eksak?
5. Mengapa energi total antar molekul berbeda tidak boleh dibandingkan langsung?
6. Mengapa single point energy dan optimasi geometri harus dibedakan?
7. Mengapa basis set besar belum tentu efisien untuk molekul besar?
8. Bagaimana cara memilih basis set untuk praktikum dasar?
9. Bagaimana cara memilih basis set untuk penelitian yang lebih serius?
10. Mengapa metode DFT dan pasca-Hartree–Fock dikembangkan setelah Hartree–Fock?

Pertanyaan pengayaan tersebut membantu mahasiswa melihat bahwa topik basis set dan Hartree–Fock tidak berhenti pada Praktikum 3. Topik ini menjadi fondasi bagi hampir seluruh kimia komputasi modern.

9. Kesalahan Konseptual yang Harus Dihindari

Beberapa kesalahan konseptual yang sering muncul dalam jawaban diskusi adalah sebagai berikut.

Kesalahan	Koreksi
Basis set besar selalu paling benar	Basis besar lebih fleksibel, tetapi tetap bergantung pada metode dan tujuan
Energi lebih rendah berarti energi eksak	Energi HF lebih rendah dalam ruang basis, tetapi korelasi belum lengkap
Hartree–Fock buruk karena metode lama	Keterbatasan HF berasal dari pendekatan medan rata-rata dan satu determinan
Basis set kecil pasti salah	Basis kecil berguna untuk latihan cepat, tetapi terbatas
Waktu komputasi hanya bergantung pada ukuran file	Waktu terutama bergantung pada jumlah fungsi basis, integral, matriks, dan iterasi
Energi total H ₂ O dapat dibandingkan langsung dengan CH ₄	Energi total hanya dibandingkan secara bermakna untuk sistem dan kondisi yang sesuai
Single point dan optimasi dianggap sama	Single point menghitung energi pada geometri tetap, optimasi mengubah geometri
SCF selesai berarti selalu valid	Harus dipastikan SCF benar-benar konvergen

Kesalahan-kesalahan ini perlu dibahas karena dapat menyebabkan interpretasi praktikum menjadi salah walaupun tabel dan grafik tampak rapi.

10. Implikasi Pembelajaran Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi pada Praktikum 3 memiliki implikasi pembelajaran penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa basis set adalah bagian inti dari metode komputasi, bukan sekadar pilihan teknis. Kedua, mahasiswa memahami bahwa energi total harus selalu dibaca dalam konteks metode dan basis. Ketiga, mahasiswa mulai memahami mengapa Hartree–Fock menjadi metode dasar tetapi tidak cukup untuk semua kebutuhan. Keempat, mahasiswa belajar menilai biaya komputasi sebagai bagian dari keputusan ilmiah. Kelima, mahasiswa belajar bahwa kimia komputasi adalah seni memilih kompromi yang tepat antara teori, akurasi, biaya, dan tujuan.

Pemahaman ini akan menjadi dasar bagi bab berikutnya. Ketika mahasiswa mempelajari DFT, mereka akan menyadari bahwa selain memilih fungsional, mereka juga harus memilih basis set. Ketika mahasiswa mempelajari HOMO-LUMO, mereka akan memahami bahwa energi orbital bergantung pada metode dan basis. Ketika mahasiswa menghitung momen dipol atau spektrum IR, mereka akan memahami bahwa kualitas geometri dan basis set memengaruhi hasil.

Dengan demikian, pertanyaan diskusi dalam subbab ini bukan sekadar penutup Praktikum 3, tetapi jembatan menuju pemahaman kimia komputasi yang lebih matang.

11. Penutup Subbab dan Arah Setelah Bab 6

Subbab 6.10 menutup rangkaian Praktikum 3 tentang Hartree–Fock, fungsi basis, dan energi total molekul. Melalui pertanyaan diskusi, mahasiswa diarahkan untuk memahami bahwa basis set lebih

besar umumnya menghasilkan energi lebih rendah karena memberi fleksibilitas orbital lebih besar, tetapi Hartree–Fock tetap belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap. Mahasiswa juga memahami bahwa basis set terlalu kecil dapat menghasilkan energi, geometri, dan sifat molekul yang kurang baik, sementara basis set lebih besar meningkatkan waktu komputasi.

Setelah subbab ini, Bab 6 secara substansi telah menyelesaikan seluruh rangkaian praktikum: tujuan, dasar teori, software, molekul model, jalur ChemCompute, jalur Python mandiri, nama file kode, output kode, analisis, dan pertanyaan diskusi. Tahap berikutnya adalah penutupan Bab 6 yang dapat memuat ringkasan bab, sintesis gagasan utama, implikasi keilmuan, implikasi praktis, keterbatasan pembahasan, arah menuju bab berikutnya, dan daftar pustaka Bab 6 apabila diminta pada instruksi berikutnya.

Penutup Bab 6

Bab 6 telah membahas Praktikum 3 tentang **Hartree–Fock, fungsi basis, dan energi total molekul**. Bab ini menjadi kelanjutan penting dari Bab 5. Jika Bab 5 menekankan optimasi geometri sebagai proses mencari struktur molekul yang stabil, maka Bab 6 memperluas pembahasan ke dasar metodologis yang lebih dalam: **bagaimana pilihan metode dan basis set memengaruhi hasil perhitungan kimia kuantum**.

Inti Bab 6 adalah pemahaman bahwa energi total molekul tidak muncul secara netral tanpa konteks. Energi total selalu terkait dengan metode, basis set, geometri, muatan, multiplicity, status SCF, dan jenis job perhitungan. Dalam bab ini, mahasiswa mempelajari bahwa notasi seperti:

```
HF/STO-3G
HF/3-21G
HF/6-31G
HF/6-31G (d)
HF/cc-pVDZ
```

bukan sekadar kode input, melainkan pernyataan metodologis. Bagian HF menunjukkan metode Hartree–Fock, sedangkan bagian setelah garis miring menunjukkan fungsi basis. Perubahan basis set dapat mengubah energi total, panjang ikatan, jumlah fungsi basis, dan waktu komputasi. Oleh karena itu, mahasiswa harus menulis dan membaca hasil komputasi secara lengkap, bukan hanya mengambil angka energi dari output.

Ringkasan Bab

Bab 6 dimulai dengan tujuan praktikum, yaitu agar mahasiswa memahami pengaruh metode Hartree–Fock dan fungsi basis terhadap energi total, panjang ikatan, dan biaya komputasi. Tujuan ini tidak hanya bersifat teknis, tetapi juga konseptual. Mahasiswa tidak cukup hanya menjalankan software; mereka harus memahami mengapa basis set lebih besar dapat menghasilkan energi lebih rendah, mengapa waktu komputasi meningkat, dan mengapa Hartree–Fock tetap memiliki keterbatasan meskipun basis set diperbesar.

Dasar teori Bab 6 membahas metode **self-consistent field** atau SCF, orbital molekul, fungsi basis, energi elektronik, prinsip variasional, serta keterbatasan Hartree–Fock. Hartree–Fock dijelaskan sebagai metode medan rata-rata yang menggunakan satu determinan Slater. Metode ini memasukkan efek exchange secara penting, tetapi belum memasukkan korelasi elektron dinamis secara lengkap. Karena itu, Hartree–Fock sangat penting sebagai metode dasar, tetapi tidak boleh diperlakukan sebagai metode eksak.

Software yang digunakan dalam bab ini meliputi **ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, dan Python**. ChemCompute digunakan sebagai platform web yang memudahkan mahasiswa menjalankan perhitungan tanpa instalasi lokal. GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan PySCF berperan sebagai mesin perhitungan struktur elektronik. Python digunakan untuk mengolah data energi, membuat tabel, menghitung selisih energi, membuat grafik energi terhadap basis set, membuat grafik waktu komputasi, dan menyusun ringkasan basis set efisien.

Molekul model yang digunakan adalah **H₂, LiH, HF, H₂O, dan CH₄**. Kelima molekul tersebut dipilih karena sederhana, tetapi memiliki karakter ikatan yang berbeda. H₂ mewakili molekul kovalen nonpolar sederhana. LiH memperkenalkan ikatan polar heteronuklir. HF memperlihatkan ikatan polar kuat. H₂O memperkenalkan molekul bengkok dengan pasangan elektron bebas. CH₄ memperlihatkan molekul tetrahedral dengan beberapa ikatan setara.

Jalur ChemCompute mengarahkan mahasiswa menjalankan **single point energy** dan **optimasi geometri** dengan variasi basis set melalui GAMESS. Jalur Python mandiri kemudian mengolah data yang diperoleh menjadi tabel dan grafik. Nama file kode resmi ditetapkan sebagai:

```
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
```

Output kode meliputi tabel energi total, grafik energi vs basis set, grafik waktu komputasi vs basis set, file CSV hasil analisis, dan ringkasan basis set paling efisien. Analisis kemudian diarahkan pada penilaian kompromi antara akurasi, ukuran basis set, dan waktu komputasi.

Sintesis Gagasan Utama Bab 6

Gagasan utama Bab 6 dapat dirumuskan sebagai berikut: **hasil kimia komputasi selalu merupakan hasil dari model dan representasi matematis tertentu**. Hartree–Fock adalah model teoritis, sedangkan basis set adalah representasi matematis orbital molekul. Keduanya menentukan energi yang diperoleh.

Basis set kecil membuat perhitungan cepat, tetapi representasi orbital terbatas. Basis set besar memberi fleksibilitas lebih besar, tetapi membutuhkan waktu komputasi lebih lama. Basis set dengan fungsi polarisasi dapat lebih baik untuk molekul dengan distribusi elektron tidak simetris, pasangan elektron bebas, atau ikatan polar. Namun, memperbesar basis set tidak otomatis menghilangkan kesalahan metode Hartree–Fock karena korelasi elektron dinamis tetap belum dimasukkan secara lengkap.

Dengan demikian, Bab 6 mengajarkan bahwa pemilihan metode dan basis set adalah keputusan ilmiah. Mahasiswa harus mempertimbangkan tujuan praktikum, ukuran molekul, sumber daya komputasi, kebutuhan akurasi, dan keterbatasan metode. Dalam kimia komputasi, pilihan yang baik bukan selalu pilihan paling mahal, tetapi pilihan yang paling sesuai dengan tujuan.

Implikasi Keilmuan

Secara keilmuan, Bab 6 memperkenalkan mahasiswa pada inti kimia kuantum komputasi modern. Mahasiswa belajar bahwa orbital molekul tidak dihitung dalam ruang tak terbatas, tetapi direpresentasikan dengan fungsi basis. Mereka juga belajar bahwa energi total bukan angka mutlak yang bebas konteks, melainkan hasil dari metode, basis set, dan prosedur SCF.

Bab ini juga memperkuat pemahaman tentang prinsip variasional. Ketika basis set diperbesar, energi Hartree–Fock umumnya menurun karena ruang fungsi menjadi lebih fleksibel. Namun, energi tersebut mendekati batas Hartree–Fock, bukan energi eksak. Selisih antara energi eksak dan energi Hartree–Fock limit berkaitan dengan energi korelasi. Pemahaman ini sangat penting karena menjadi dasar untuk mempelajari metode pasca-Hartree–Fock, DFT, MP2, coupled cluster, dan metode korelasi elektron lainnya.

Secara konseptual, Bab 6 menempatkan Hartree–Fock sebagai fondasi, bukan akhir. Mahasiswa perlu menghargai Hartree–Fock karena metode ini membangun bahasa orbital molekul, SCF, exchange, basis set, dan energi elektronik. Namun, mahasiswa juga harus menyadari batasnya agar tidak membuat klaim berlebihan.

Implikasi Praktis

Secara praktis, Bab 6 melatih mahasiswa menyusun workflow komputasi yang tertib. Mahasiswa belajar menjalankan perhitungan dengan beberapa basis set, mencatat energi total, mencatat jumlah fungsi basis, mencatat waktu komputasi, memeriksa status SCF, dan menyusun data dalam tabel.

Python menjadi alat penting dalam tahap analisis. Mahasiswa belajar bahwa data dari output software harus diolah secara sistematis. Grafik energi terhadap basis set membantu membaca pola penurunan energi. Grafik waktu komputasi membantu membaca biaya perhitungan. Tabel selisih energi membantu membaca kecenderungan konvergensi basis set sederhana. Ringkasan basis set efisien membantu menilai kompromi antara kualitas hasil dan biaya.

Keterampilan ini penting untuk penelitian. Dalam artikel ilmiah, skripsi, tesis, atau laporan riset, peneliti harus menyebutkan metode, basis set, software, geometri, status konvergensi, dan parameter komputasi. Hasil tanpa detail metodologis tidak dapat dievaluasi. Bab 6 melatih kebiasaan tersebut sejak praktikum dasar.

Keterbatasan Pembahasan Bab 6

Bab 6 memiliki beberapa keterbatasan yang perlu dicatat.

Pertama, pembahasan masih berfokus pada molekul kecil. H_2 , LiH, HF, H_2O , dan CH_4 sangat baik untuk pembelajaran dasar, tetapi belum mewakili kompleksitas molekul besar, sistem logam transisi, biomolekul, radikal, keadaan tereksitasi, atau sistem dengan korelasi elektron kuat.

Kedua, analisis konvergensi basis set masih bersifat sederhana. Mahasiswa hanya membandingkan energi antar basis set dan melihat apakah perubahan energi makin kecil. Bab ini belum membahas ekstrapolasi basis set secara formal menuju complete basis set limit.

Ketiga, metode yang ditekankan adalah Hartree–Fock. Metode ini penting sebagai dasar, tetapi belum memasukkan korelasi elektron secara lengkap. Karena itu, hasil energi dan sifat molekul dari Hartree–Fock harus ditafsirkan dengan hati-hati.

Keempat, waktu komputasi dalam praktikum dapat dipengaruhi oleh platform, server, hardware, dan beban sistem. Karena itu, waktu komputasi sebaiknya digunakan sebagai indikator relatif dalam platform yang sama, bukan angka universal.

Kelima, basis set yang dibahas masih terbatas pada basis set umum untuk pembelajaran, seperti STO-3G, 3-21G, 6-31G, 6-31G(d), dan cc-pVDZ. Basis set lanjutan, basis difus, basis untuk unsur berat, effective core potential, dan basis relativistik belum dibahas mendalam.

Arah Menuju Bab Berikutnya

Setelah memahami Hartree–Fock dan basis set, mahasiswa siap memasuki pembahasan metode yang lebih luas. Bab berikutnya dapat mengarahkan mahasiswa pada metode yang memperbaiki atau melengkapi keterbatasan Hartree–Fock, seperti **Density Functional Theory**, analisis orbital, HOMO-LUMO, momen dipol, atau sifat elektronik molekul.

Pemahaman Bab 6 akan terus digunakan. Ketika mahasiswa memakai DFT, basis set tetap harus dipilih. Ketika mahasiswa menghitung HOMO-LUMO, energi orbital tetap bergantung pada metode dan basis set. Ketika mahasiswa menghitung momen dipol, distribusi elektron yang dihitung tetap dipengaruhi oleh basis set. Ketika mahasiswa menghitung spektrum IR, geometri dan Hessian tetap dipengaruhi oleh kualitas metode dan basis.

Dengan demikian, Bab 6 merupakan fondasi metodologis. Mahasiswa yang memahami Bab 6 akan lebih kritis dalam menggunakan software kimia komputasi, lebih cermat dalam membaca output, dan lebih proporsional dalam menulis kesimpulan.

Daftar Pustaka Bab 6

Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular Quantum Mechanics* (5th ed.). Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Ditchfield, R., Hehre, W. J., & Pople, J. A. (1971). Self-consistent molecular-orbital methods. IX. An extended Gaussian-type basis for molecular-orbital studies of organic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 54(2), 724–728.

Dunning, T. H. Jr. (1989). Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 90(2), 1007–1023.

Fock, V. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physik*, 61, 126–148.

Gordon, M. S., & Schmidt, M. W. (2005). Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later. In C. E. Dykstra, G. Frenking, K. S. Kim, & G. E. Scuseria (Eds.), *Theory and Applications of Computational Chemistry: The First Forty Years* (pp. 1167–1189). Elsevier.

Hall, G. G. (1951). The molecular orbital theory of chemical valency. VIII. A method of calculating ionization potentials. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 205(1083), 541–552.

Hartree, D. R. (1928). The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 89–110.

Hehre, W. J., Ditchfield, R., & Pople, J. A. (1972). Self-consistent molecular orbital methods. XII. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular orbital studies of organic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 56(5), 2257–2261.

Helgaker, T., Jørgensen, P., & Olsen, J. (2000). *Molecular Electronic-Structure Theory*. John Wiley & Sons.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.

Pople, J. A., & Nesbet, R. K. (1954). Self-consistent orbitals for radicals. *The Journal of Chemical Physics*, 22(3), 571–572.

Roothaan, C. C. J. (1951). New developments in molecular orbital theory. *Reviews of Modern Physics*, 23(2), 69–89.

Sun, Q., Berkelbach, T. C., Blunt, N. S., Booth, G. H., Guo, S., Li, Z., Liu, J., McClain, J. D., Sayfutyarova, E. R., Sharma, S., Wouters, S., & Chan, G. K.-L. (2018). PySCF: The Python-based simulations of chemistry framework. *WIREs Computational Molecular Science*, 8(1), e1340.

Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications.

BAB 7

PRAKTIKUM 4: DFT, HOMO-LUMO, DAN REAKTIVITAS MOLEKUL

Bab 7 memasuki tahap yang lebih maju dalam praktikum kimia kuantum. Jika Bab 6 menempatkan **Hartree–Fock** dan **basis set** sebagai fondasi awal untuk memahami energi total molekul, maka Bab 7 memperluas pembahasan menuju **Density Functional Theory**, **orbital batas**, dan **reaktivitas molekul**. Fokus utama bab ini adalah bagaimana mahasiswa dapat menggunakan perhitungan struktur elektronik untuk memahami kecenderungan suatu molekul dalam menerima elektron, menyumbangkan elektron, mengalami delokalisasi, merespons substituen, serta menunjukkan stabilitas atau reaktivitas tertentu.

Dalam kimia organik dan kimia fisik, konsep reaktivitas molekul sering dijelaskan melalui gugus fungsi, elektronegativitas, resonansi, efek induktif, hiperkonjugasi, dan struktur Lewis. Konsep-konsep tersebut sangat penting, tetapi dalam kimia komputasi dapat diperkuat melalui data struktur elektronik. Melalui perhitungan DFT dan analisis HOMO-LUMO, mahasiswa dapat melihat bahwa reaktivitas tidak hanya dapat dijelaskan secara verbal, tetapi juga dapat dianalisis melalui energi orbital, celah energi, distribusi orbital, dan parameter reaktivitas global.

DFT atau **Density Functional Theory** menjadi salah satu metode paling luas digunakan dalam kimia komputasi modern karena menawarkan kompromi yang baik antara akurasi dan biaya komputasi. Berbeda dari Hartree–Fock yang membangun teori terutama dari fungsi gelombang banyak elektron, DFT menggunakan **kepadatan elektron** sebagai variabel utama. Gagasan ini memiliki dasar historis penting dalam teorema Hohenberg–Kohn dan formulasi Kohn–Sham. Dalam praktiknya, DFT memungkinkan perhitungan molekul berukuran kecil sampai menengah dengan biaya yang relatif lebih terjangkau dibanding banyak metode pasca-Hartree–Fock.

Namun, DFT tidak boleh dipahami sebagai metode yang selalu benar secara otomatis. DFT bergantung pada pilihan fungsional, basis set, parameter perhitungan, dan tujuan analisis. Fungsional seperti B3LYP, PBE, PBE0, M06, atau lainnya memiliki karakter dan wilayah penerapan masing-masing. Oleh karena itu, Bab 7 tetap mempertahankan sikap kritis yang telah dibangun sejak bab-bab sebelumnya: software menghasilkan angka, tetapi penalaran kimia tetap diperlukan untuk memahami maknanya.

Salah satu konsep utama dalam Bab 7 adalah **HOMO** dan **LUMO**. HOMO, atau *Highest Occupied Molecular Orbital*, adalah orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Secara konseptual, HOMO sering dikaitkan dengan kemampuan molekul menyumbangkan elektron. LUMO, atau *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*, adalah orbital molekul kosong dengan energi terendah. Secara konseptual, LUMO sering dikaitkan dengan kemampuan molekul menerima elektron. Interaksi antara HOMO dan LUMO menjadi dasar penting dalam teori orbital frontier yang dikembangkan oleh Kenichi Fukui dan menjadi salah satu kerangka penting dalam memahami reaktivitas kimia.

Celah energi antara HOMO dan LUMO, atau **gap HOMO-LUMO**, sering digunakan sebagai indikator kasar stabilitas dan reaktivitas molekul. Molekul dengan gap besar biasanya dianggap lebih stabil secara elektronik dan kurang mudah mengalami eksitasi atau reaksi tertentu. Molekul dengan gap kecil sering dianggap lebih reaktif atau lebih mudah mengalami transisi elektronik. Namun, interpretasi ini harus dilakukan secara hati-hati. Gap HOMO-LUMO bukan satu-satunya penentu reaktivitas. Reaktivitas juga dipengaruhi oleh geometri, polaritas, muatan, lingkungan pelarut, efek substituen, mekanisme reaksi, dan kondisi eksperimen.

Bab 7 menggunakan molekul model **etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena**. Pemilihan molekul ini bersifat pedagogis. Etilena memperkenalkan ikatan rangkap sederhana dan sistem π paling dasar. Butadiena memperlihatkan efek konjugasi dan penurunan gap akibat delokalisasi π . Benzena memperkenalkan aromaticitas dan delokalisasi elektron yang lebih stabil. Formaldehida memperkenalkan gugus karbonil dengan LUMO π^* yang penting dalam reaksi adisi nukleofilik. Nitrobenzena memperlihatkan pengaruh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron terhadap distribusi elektron dan reaktivitas cincin aromatik.

Dengan demikian, Bab 7 tidak hanya melatih mahasiswa menjalankan DFT, tetapi juga menghubungkan hasil komputasi dengan konsep kimia organik dan kimia fisik. Mahasiswa akan belajar bahwa data orbital dapat digunakan untuk menjelaskan mengapa butadiena lebih terdelokalisasi daripada etilena, mengapa benzena memiliki kestabilan khusus, mengapa formaldehida dapat bertindak sebagai akseptor elektron pada orbital π^* , dan bagaimana gugus nitro memengaruhi distribusi elektron pada nitrobenzena.

Secara praktis, Bab 7 juga memperkenalkan workflow yang lebih kompleks. Mahasiswa dapat menggunakan ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol, dan Python. ChemCompute dapat digunakan sebagai jalur berbasis web. ORCA, GAMESS, atau Gaussian dapat digunakan untuk menjalankan perhitungan DFT. Avogadro membantu membangun struktur molekul. Gabedit, Molden, dan Jmol dapat digunakan untuk visualisasi orbital. Python digunakan untuk menghitung gap HOMO-LUMO, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, indeks elektrofilitas sederhana, grafik perbandingan gap, dan diagram tingkat energi orbital.

Secara pedagogis, Bab 7 menjadi jembatan antara perhitungan energi dan interpretasi reaktivitas. Pada bab-bab sebelumnya, mahasiswa telah mempelajari struktur molekul, input-output, optimasi geometri, Hartree–Fock, basis set, dan energi total. Pada Bab 7, semua keterampilan itu digunakan untuk membaca struktur elektronik secara lebih kimiawi. Mahasiswa tidak hanya bertanya “berapa energinya?”, tetapi mulai bertanya “apa makna energi orbital ini terhadap reaktivitas molekul?”

7.1 Tujuan Praktikum

Tujuan utama Praktikum 4 adalah agar mahasiswa mampu melakukan perhitungan **Density Functional Theory**, memvisualisasikan **HOMO-LUMO**, dan menafsirkan **reaktivitas molekul** berdasarkan struktur elektronik. Tujuan ini menunjukkan bahwa Praktikum 4 tidak hanya bersifat teknis, tetapi juga konseptual dan interpretatif. Mahasiswa tidak cukup hanya menjalankan

software dan mengambil nilai energi orbital; mereka harus mampu menjelaskan hubungan antara orbital, gap energi, donor elektron, akseptor elektron, konjugasi, substituen, stabilitas, dan reaktivitas.

Secara umum, Praktikum 4 diarahkan untuk membentuk kemampuan berikut:

1. Memahami prinsip dasar DFT sebagai metode struktur elektronik.
2. Menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris pada molekul model.
3. Mengambil nilai energi HOMO dan LUMO dari output perhitungan.
4. Menghitung celah energi HOMO-LUMO.
5. Memvisualisasikan bentuk orbital HOMO dan LUMO.
6. Menafsirkan HOMO sebagai indikator kecenderungan donor elektron.
7. Menafsirkan LUMO sebagai indikator kecenderungan akseptor elektron.
8. Menghubungkan gap HOMO-LUMO dengan stabilitas dan reaktivitas molekul.
9. Menghitung parameter reaktivitas global sederhana.
10. Membandingkan pengaruh konjugasi dan substituen terhadap struktur elektronik molekul.
11. Menyusun tabel dan grafik reaktivitas menggunakan Python.
12. Menulis analisis ilmiah berdasarkan data orbital, bukan hanya berdasarkan dugaan kualitatif.

Tujuan tersebut menempatkan Praktikum 4 sebagai latihan integratif. Mahasiswa menggabungkan teori DFT, teori orbital molekul, kimia organik, kimia fisik, visualisasi molekul, dan analisis data. Dengan demikian, praktikum ini menjadi salah satu bagian penting dalam buku karena mulai membawa mahasiswa dari tahap “menghitung” menuju tahap “menafsirkan”.

1. Memahami DFT sebagai Metode Struktur Elektronik

Tujuan pertama adalah agar mahasiswa memahami DFT sebagai salah satu metode utama dalam kimia komputasi modern. DFT berbeda dari Hartree–Fock dalam cara mendekati persoalan banyak elektron. Jika Hartree–Fock menggunakan fungsi gelombang satu determinan sebagai objek utama, DFT menggunakan kerapatan elektron sebagai variabel fundamental.

Secara sederhana, DFT dapat dipahami melalui gagasan berikut:

fungsi gelombang banyak elektron
→ sangat kompleks untuk sistem besar

kerapatan elektron
→ lebih sederhana secara konsep
→ bergantung pada tiga koordinat ruang
→ digunakan sebagai dasar DFT

Dalam praktik komputasi, DFT sering dijalankan melalui skema Kohn–Sham. Skema ini memperkenalkan orbital Kohn–Sham sebagai alat matematis untuk menghasilkan kerapatan elektron. Mahasiswa perlu memahami bahwa orbital Kohn–Sham berguna untuk interpretasi,

tetapi statusnya tidak selalu identik dengan orbital observabel langsung. Oleh karena itu, penggunaan energi HOMO-LUMO dari DFT harus dilakukan secara hati-hati dan proporsional.

Tujuan ini penting karena banyak mahasiswa mengenal DFT hanya sebagai pilihan menu dalam software. Padahal, DFT adalah metode dengan dasar teoritis, asumsi, kekuatan, dan keterbatasan. Mahasiswa perlu memahami bahwa pilihan fungsional dan basis set memengaruhi hasil. Dengan demikian, perhitungan DFT harus selalu dilaporkan secara lengkap, misalnya:

```
Metode       : DFT
Fungsional   : B3LYP
Basis set    : 6-31G(d)
Software     : ORCA / GAMESS / Gaussian / ChemCompute
Molekul      : benzena
Job          : optimasi geometri dan perhitungan orbital
```

Penulisan seperti ini lebih ilmiah daripada sekadar menyatakan “molekul dihitung dengan DFT”.

2. Memahami HOMO sebagai Orbital Donor Elektron

Tujuan kedua adalah agar mahasiswa memahami makna HOMO. HOMO adalah orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Karena sudah terisi elektron dan memiliki energi paling tinggi di antara orbital terisi, HOMO sering dikaitkan dengan kecenderungan molekul menyumbangkan elektron.

Dalam reaksi kimia, molekul atau bagian molekul dengan HOMO relatif tinggi dapat lebih mudah menyumbangkan elektron kepada akseptor. Oleh karena itu, HOMO sering dipakai untuk memahami sifat nukleofilik, donor elektron, dan kecenderungan oksidasi secara kualitatif.

Secara konseptual:

```
HOMO tinggi
→ elektron lebih mudah didonorkan
→ kecenderungan donor elektron lebih kuat
```

Namun, mahasiswa harus memahami batas interpretasi ini. HOMO bukan satu-satunya penentu reaktivitas. Reaksi kimia juga dipengaruhi oleh muatan, sterik, pelarut, orientasi orbital, mekanisme reaksi, dan energi keadaan transisi. Oleh karena itu, Praktikum 4 tidak mengajarkan bahwa “HOMO tinggi pasti paling reaktif”, tetapi mengajarkan bahwa HOMO dapat menjadi salah satu indikator penting dalam analisis reaktivitas.

Contoh konkret dapat dilihat pada butadiena. Karena butadiena memiliki sistem π terkonjugasi, orbital π -nya lebih terdelokalisasi dibanding etilena. Delokalisasi ini dapat memengaruhi energi orbital dan gap HOMO-LUMO. Dengan memvisualisasikan HOMO butadiena, mahasiswa dapat melihat bagaimana orbital menyebar di sepanjang sistem konjugasi.

3. Memahami LUMO sebagai Orbital Akseptor Elektron

Tujuan ketiga adalah agar mahasiswa memahami makna LUMO. LUMO adalah orbital molekul kosong dengan energi terendah. Karena belum terisi dan memiliki energi paling rendah di antara orbital kosong, LUMO sering dikaitkan dengan kemampuan molekul menerima elektron.

Secara konseptual:

LUMO rendah

→ lebih mudah menerima elektron

→ kecenderungan akseptor elektron lebih kuat

Dalam reaksi kimia, LUMO penting untuk memahami sifat elektrofilik dan kecenderungan menerima pasangan elektron dari nukleofil. Formaldehida merupakan contoh penting. Gugus karbonil memiliki orbital π^* yang dapat bertindak sebagai LUMO penting dalam reaksi adisi nukleofilik. Nukleofil menyerang karbon karbonil karena interaksi donor-akseptor antara HOMO nukleofil dan LUMO karbonil.

Nitrobenzena juga dapat digunakan untuk memahami efek substituen penarik elektron. Gugus nitro dapat menurunkan energi orbital tertentu dan memengaruhi distribusi elektron pada cincin aromatik. Dengan memvisualisasikan LUMO nitrobenzena, mahasiswa dapat melihat bagaimana gugus nitro memengaruhi daerah molekul yang berpotensi menerima kerapatan elektron.

Namun, seperti HOMO, LUMO juga harus ditafsirkan hati-hati. Bentuk dan energi LUMO bergantung pada metode, fungsional, basis set, dan geometri. Oleh karena itu, tujuan praktikum bukan menghasilkan kesimpulan mutlak, tetapi membangun pemahaman bahwa LUMO merupakan indikator penting dalam analisis akseptor elektron.

4. Menghitung Gap HOMO-LUMO

Tujuan keempat adalah agar mahasiswa mampu menghitung **gap HOMO-LUMO**, yaitu selisih energi antara LUMO dan HOMO.

Rumusnya:

$$\text{Gap HOMO-LUMO} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

Jika energi orbital dinyatakan dalam eV, maka gap juga dalam eV. Jika energi orbital masih dalam Hartree, mahasiswa dapat mengonversinya ke eV dengan faktor konversi yang sesuai.

Gap HOMO-LUMO sering digunakan sebagai indikator sederhana stabilitas elektronik dan reaktivitas. Molekul dengan gap besar cenderung lebih sulit mengalami eksitasi elektronik dan sering dianggap lebih stabil secara elektronik. Molekul dengan gap kecil cenderung lebih mudah mengalami transisi elektronik dan sering dikaitkan dengan reaktivitas lebih tinggi.

Namun, interpretasi ini harus dibuat proporsional:

gap besar

- stabilitas elektronik relatif lebih tinggi
- reaktivitas elektronik relatif lebih rendah

gap kecil

- transisi elektronik lebih mudah
- reaktivitas elektronik relatif lebih tinggi

Mahasiswa harus memahami bahwa gap HOMO-LUMO adalah indikator, bukan hukum tunggal. Reaktivitas aktual tetap bergantung pada konteks reaksi. Dalam laporan, pernyataan yang baik adalah:

Butadiena memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada etilena dalam data praktikum ini. Hal tersebut dapat dikaitkan dengan delokalisasi elektron π pada sistem terkonjugasi, yang memperkecil pemisahan energi antara orbital terisi dan orbital kosong.

Pernyataan yang kurang tepat adalah:

Butadiena pasti lebih reaktif dalam semua reaksi karena gap-nya kecil.

Pernyataan kedua terlalu mutlak dan tidak mempertimbangkan mekanisme reaksi.

5. Menghubungkan Konjugasi dengan Gap HOMO-LUMO

Tujuan kelima adalah agar mahasiswa mampu menghubungkan konjugasi dengan perubahan gap HOMO-LUMO. Molekul model etilena dan butadiena dipilih untuk tujuan ini. Etilena memiliki satu ikatan rangkap C=C, sedangkan butadiena memiliki dua ikatan rangkap terkonjugasi.

Dalam sistem π terkonjugasi, orbital π dapat menyebar pada lebih banyak atom. Delokalisasi ini menyebabkan tingkat energi orbital berubah. Secara umum, semakin panjang sistem konjugasi, gap antara HOMO dan LUMO dapat menjadi lebih kecil. Inilah sebabnya molekul terkonjugasi sering memiliki sifat elektronik dan optik yang berbeda dari molekul nonkonjugasi atau molekul dengan konjugasi pendek.

Contoh hubungan konseptual:

etilena

- satu ikatan π
- sistem π pendek
- gap relatif lebih besar

butadiena

- dua ikatan π terkonjugasi
- orbital π lebih terdelokalisasi
- gap relatif lebih kecil

Tujuan ini penting karena menghubungkan hasil komputasi dengan kimia organik. Mahasiswa tidak hanya melihat angka gap, tetapi memahami alasan kimianya. Dengan demikian, Praktikum 4 memperkuat konsep bahwa konjugasi memengaruhi struktur elektronik molekul.

6. Menghubungkan Substituen dengan Distribusi Elektron

Tujuan keenam adalah agar mahasiswa mampu menganalisis pengaruh substituen terhadap distribusi elektron. Nitrobenzena digunakan sebagai molekul model karena gugus nitro dikenal sebagai gugus penarik elektron. Gugus ini dapat memengaruhi distribusi elektron pada cincin benzena melalui efek induktif dan resonansi.

Dalam konteks orbital, gugus nitro dapat memengaruhi energi dan distribusi HOMO-LUMO. Visualisasi orbital dapat menunjukkan apakah orbital tertentu banyak terlokalisasi pada cincin, pada gugus nitro, atau tersebar pada seluruh sistem. Analisis ini membantu mahasiswa memahami bahwa substituen tidak hanya mengubah nama molekul, tetapi juga mengubah struktur elektroniknya.

Contoh analisis yang diharapkan:

Pada nitrobenzena, gugus nitro sebagai substituen penarik elektron memengaruhi distribusi orbital dan dapat menurunkan kecenderungan cincin benzena untuk bertindak sebagai donor elektron. Visualisasi LUMO dapat menunjukkan peran gugus nitro dalam menerima kerapatan elektron.

Tujuan ini penting karena menghubungkan kimia komputasi dengan konsep efek substituen dalam kimia organik aromatik.

7. Menghitung Parameter Reaktivitas Global Sederhana

Tujuan ketujuh adalah agar mahasiswa mampu menghitung beberapa parameter reaktivitas global sederhana berdasarkan energi HOMO dan LUMO. Parameter yang digunakan dalam Praktikum 4 meliputi:

1. **Gap HOMO-LUMO**
2. **Hardness**
3. **Softness**
4. **Elektronegativitas Mulliken**
5. **Indeks elektrofilisitas sederhana**

Secara konseptual, parameter-parameter tersebut dapat dihitung sebagai berikut:

$$\text{Gap} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\text{Hardness } (\eta) = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}) / 2$$

$$\text{Softness } (S) = 1 / \eta$$

$$\text{Elektronegativitas Mulliken } (\chi) = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$$

$$\text{Indeks elektrofilitas } (\omega) = \chi^2 / (2\eta)$$

Parameter ini tidak boleh dipahami sebagai kebenaran mutlak, tetapi sebagai indikator global yang membantu membandingkan molekul. Hardness menggambarkan resistensi molekul terhadap perubahan distribusi elektron. Softness menggambarkan kemudahan distribusi elektron berubah. Elektronegativitas Mulliken menggambarkan kecenderungan menarik elektron berdasarkan energi orbital. Indeks elektrofilitas menggambarkan kecenderungan menerima elektron secara global.

Dengan menghitung parameter tersebut, mahasiswa belajar bahwa HOMO-LUMO dapat dikembangkan menjadi analisis reaktivitas yang lebih terstruktur.

8. Memvisualisasikan Orbital Molekul

Tujuan kedelapan adalah agar mahasiswa mampu memvisualisasikan HOMO dan LUMO. Visualisasi orbital penting karena energi orbital saja belum cukup. Dua molekul dapat memiliki gap berbeda, tetapi bentuk orbital juga menentukan lokasi reaktivitas.

Visualisasi HOMO dan LUMO dapat dilakukan menggunakan Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol, atau software visualisasi lain. Mahasiswa harus memperhatikan:

1. Di bagian mana HOMO terlokalisasi?
2. Di bagian mana LUMO terlokalisasi?
3. Apakah orbital tersebar pada sistem π ?
4. Apakah orbital terkonsentrasi pada gugus fungsi tertentu?
5. Apakah substituen memengaruhi bentuk orbital?
6. Bagaimana bentuk orbital mendukung interpretasi donor atau akseptor elektron?

Contoh:

Jika LUMO formaldehida memiliki kontribusi besar pada orbital π^* karbonil, maka hal ini mendukung pemahaman bahwa karbonil dapat bertindak sebagai pusat penerima elektron dalam reaksi adisi nukleofilik.

Visualisasi membantu mahasiswa menghubungkan angka dengan bentuk. Inilah salah satu kekuatan praktikum kimia komputasi: mahasiswa dapat melihat struktur elektronik yang sebelumnya hanya dijelaskan secara abstrak.

9. Menyusun Analisis dengan Python

Tujuan kesembilan adalah agar mahasiswa mampu menggunakan Python untuk menyusun analisis. Dalam Praktikum 4, Python digunakan untuk:

1. Memasukkan energi HOMO dan LUMO.
2. Menghitung gap HOMO-LUMO.
3. Menghitung hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilisitas.
4. Membuat grafik perbandingan gap antar molekul.
5. Membuat diagram tingkat energi orbital.
6. Menyimpan hasil ke file CSV.
7. Membuat tabel reaktivitas global.

Python membantu mahasiswa bekerja sistematis. Jika data HOMO-LUMO untuk etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena dianalisis manual, kesalahan salin dan kesalahan hitung mudah terjadi. Dengan Python, semua perhitungan dapat dilakukan konsisten dan dapat diulang.

Tujuan ini melanjutkan keterampilan yang telah dibangun pada Bab 6. Jika pada Bab 6 Python digunakan untuk menganalisis energi total dan basis set, maka pada Bab 7 Python digunakan untuk menganalisis struktur elektronik dan reaktivitas molekul.

10. Mengembangkan Sikap Kritis terhadap Analisis HOMO-LUMO

Tujuan terakhir adalah membangun sikap kritis. Analisis HOMO-LUMO sangat berguna, tetapi sering disalahgunakan jika dianggap sebagai satu-satunya penentu reaktivitas. Mahasiswa harus memahami bahwa HOMO-LUMO adalah model interpretatif. Ia membantu membaca kecenderungan donor-akseptor elektron, tetapi tidak menggantikan analisis mekanisme reaksi secara lengkap.

Beberapa batas analisis HOMO-LUMO yang perlu dipahami:

1. Energi orbital bergantung pada metode dan basis set.
2. Energi orbital Kohn–Sham dalam DFT harus ditafsirkan hati-hati.
3. Reaktivitas aktual dipengaruhi oleh lingkungan dan mekanisme.
4. Gap kecil tidak selalu berarti molekul paling reaktif dalam semua konteks.
5. Bentuk orbital sama pentingnya dengan energi orbital.
6. Substituen dapat memengaruhi orbital secara lokal maupun global.
7. Data komputasi harus dibandingkan dengan konsep kimia dan literatur.

Dengan sikap kritis ini, mahasiswa dapat menggunakan HOMO-LUMO secara ilmiah. Mereka tidak hanya membuat tabel dan grafik, tetapi mampu menulis analisis yang proporsional.

11. Indikator Keberhasilan Praktikum

Praktikum 4 dapat dianggap berhasil jika mahasiswa mampu:

1. Menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris pada molekul model.
2. Mengambil nilai energi HOMO dan LUMO dari output.
3. Menghitung gap HOMO-LUMO dengan benar.
4. Memvisualisasikan HOMO dan LUMO.
5. Menjelaskan makna HOMO sebagai donor elektron.
6. Menjelaskan makna LUMO sebagai akseptor elektron.
7. Menghubungkan gap dengan stabilitas dan reaktivitas secara hati-hati.
8. Menjelaskan pengaruh konjugasi pada etilena dan butadiena.
9. Menjelaskan pengaruh gugus nitro pada nitrobenzena.
10. Menghitung parameter reaktivitas global sederhana.
11. Membuat grafik gap antar molekul.
12. Membuat diagram tingkat energi orbital.
13. Menyusun file CSV hasil analisis.
14. Menulis kesimpulan yang berbasis data dan tidak berlebihan.

Indikator keberhasilan ini penting agar mahasiswa mengetahui standar capaian praktikum. Praktikum bukan selesai ketika output berhasil diunduh, tetapi ketika data berhasil ditafsirkan secara ilmiah.

12. Transisi ke Dasar Teori

Subbab 7.1 telah menetapkan tujuan Praktikum 4, yaitu melakukan perhitungan DFT, memvisualisasikan HOMO-LUMO, dan menafsirkan reaktivitas molekul berdasarkan struktur elektronik. Tujuan ini akan menjadi dasar bagi seluruh alur Bab 7.

Subbab berikutnya akan membahas dasar teori. Pada subbab 7.2, pembahasan akan diarahkan pada Density Functional Theory, energi orbital, celah HOMO-LUMO, donor elektron, akseptor elektron, dan reaktivitas molekul. Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap membaca teori bukan sebagai konsep abstrak, tetapi sebagai landasan untuk menganalisis data molekul model secara kritis.

7.2 Dasar Teori

Dasar teori Praktikum 4 berpusat pada hubungan antara **Density Functional Theory (DFT)**, **energi orbital**, **HOMO**, **LUMO**, **gap HOMO-LUMO**, **donor elektron**, **akseptor elektron**, dan **reaktivitas molekul**. Subbab ini menjadi fondasi konseptual sebelum mahasiswa menjalankan perhitungan, mengambil data energi orbital, memvisualisasikan bentuk orbital, menghitung parameter reaktivitas global, dan menyusun analisis dengan Python.

Pada bab sebelumnya, mahasiswa telah mempelajari bahwa metode Hartree–Fock dan fungsi basis memengaruhi energi total molekul. Dalam Bab 7, perhatian bergeser dari energi total menuju **struktur elektronik yang berkaitan langsung dengan reaktivitas**. Pertanyaan utama yang hendak dijawab bukan lagi hanya “berapa energi total molekul?”, tetapi “bagian mana dari molekul yang cenderung menyumbangkan elektron?”, “bagian mana yang cenderung menerima elektron?”, “mengapa sistem terkonjugasi memiliki gap lebih kecil?”, dan “bagaimana substituen mengubah distribusi elektron?”

Praktikum ini memanfaatkan DFT karena metode tersebut sangat banyak digunakan dalam kimia komputasi modern. DFT relatif efisien untuk molekul organik kecil sampai menengah, cukup praktis untuk pembelajaran, dan mampu memberikan gambaran struktur elektronik yang berguna untuk analisis kimia. Namun, DFT juga memiliki batas. Hasil DFT bergantung pada fungsional, basis set, geometri, serta pengaturan perhitungan. Karena itu, teori dalam subbab ini tidak boleh dibaca sebagai pembenaran bahwa semua hasil DFT pasti benar, tetapi sebagai dasar agar mahasiswa dapat menggunakan DFT secara sadar, kritis, dan proporsional.

1. Density Functional Theory sebagai Metode Struktur Elektronik

Density Functional Theory atau **DFT** adalah metode struktur elektronik yang menggunakan **kepadatan elektron** sebagai variabel utama untuk menghitung energi dan sifat sistem molekul. Dalam mekanika kuantum molekul, sistem banyak elektron secara formal dapat dijelaskan oleh fungsi gelombang banyak elektron. Akan tetapi, fungsi gelombang banyak elektron sangat kompleks karena bergantung pada koordinat seluruh elektron. Jika ada N elektron, fungsi gelombang bergantung pada banyak variabel ruang dan spin.

DFT menawarkan sudut pandang berbeda. Alih-alih menjadikan fungsi gelombang sebagai objek utama, DFT menggunakan kepadatan elektron $\rho(\mathbf{r})$. Kepadatan elektron menggambarkan distribusi probabilitas elektron dalam ruang. Secara konseptual, kepadatan elektron lebih sederhana daripada fungsi gelombang banyak elektron karena hanya bergantung pada tiga koordinat ruang.

Perbandingan sederhana:

Pendekatan	Objek Utama	Ciri Konseptual
Hartree–Fock	Fungsi gelombang satu determinan	Menekankan orbital dan exchange, tetapi korelasi belum lengkap
DFT	Kepadatan elektron	Menekankan energi sebagai fungsi dari kepadatan elektron
Pasca-Hartree–Fock	Fungsi gelombang lebih kompleks	Memasukkan korelasi elektron lebih eksplisit, tetapi lebih mahal

Secara praktis, DFT digunakan karena memberi kompromi yang baik antara kualitas hasil dan biaya komputasi. Untuk banyak molekul organik, DFT dapat memberikan geometri, energi relatif, momen dipol, frekuensi vibrasi, dan sifat elektronik dengan biaya yang lebih terjangkau dibanding banyak metode korelasi gelombang tingkat tinggi.

Namun, DFT bukan metode tunggal. Ketika seseorang menulis “menggunakan DFT”, pernyataan itu masih belum lengkap. Harus disebutkan fungsional dan basis set, misalnya:

```
B3LYP/6-31G(d)
PBE0/def2-SVP
PBE/def2-TZVP
M06-2X/6-31+G(d,p)
```

Dalam Praktikum 4, mahasiswa harus memahami bahwa DFT adalah kerangka umum, sedangkan hasil konkret bergantung pada fungsional dan basis set yang dipilih.

2. Latar Historis DFT

Secara historis, DFT berkembang dari gagasan bahwa kerapatan elektron dapat memuat informasi mendasar tentang sistem banyak elektron. Fondasi teoritis modern DFT biasanya dikaitkan dengan **teorema Hohenberg–Kohn** pada tahun 1964 dan formulasi **Kohn–Sham** pada tahun 1965. Hohenberg dan Kohn menunjukkan bahwa energi keadaan dasar sistem elektron dapat dipandang sebagai fungsi dari kerapatan elektron. Kohn dan Sham kemudian mengembangkan formulasi praktis dengan memperkenalkan sistem elektron noninteraksi yang menghasilkan kerapatan elektron sama dengan sistem elektron nyata.

Formulasi Kohn–Sham sangat penting karena membuat DFT dapat dijalankan secara komputasional. Dalam formulasi ini, digunakan orbital Kohn–Sham sebagai alat matematis. Orbital tersebut bukan fungsi gelombang banyak elektron eksak, tetapi membantu membangun kerapatan elektron. Dari kerapatan elektron tersebut, energi total dihitung melalui berbagai komponen, termasuk energi kinetik efektif, interaksi elektron-inti, interaksi Coulomb, dan suku exchange-correlation.

Salah satu tantangan terbesar DFT adalah bentuk eksak dari **exchange-correlation functional** tidak diketahui secara umum. Karena itu, banyak fungsional dikembangkan, mulai dari Local Density Approximation, Generalized Gradient Approximation, meta-GGA, hybrid functional, hingga range-separated functional. Setiap fungsional membawa asumsi dan karakter tertentu.

Dalam konteks pembelajaran, latar historis ini penting karena mahasiswa perlu memahami bahwa DFT bukan sekadar tombol dalam software. DFT adalah hasil perkembangan panjang teori struktur elektronik, dari pemikiran tentang kerapatan elektron sampai implementasi komputasi modern dalam software seperti ORCA, GAMESS, Gaussian, Psi4, dan program lainnya.

3. Teori Kohn–Sham secara Konseptual

Formulasi Kohn–Sham menyederhanakan masalah banyak elektron dengan memperkenalkan sistem referensi elektron noninteraksi. Sistem ini tidak identik dengan sistem molekul nyata, tetapi

dirancang agar menghasilkan kerapatan elektron yang sama dengan sistem nyata. Dengan demikian, perhitungan dapat dilakukan melalui orbital-orbital Kohn–Sham.

Secara konseptual, energi DFT Kohn–Sham dapat dipandang sebagai gabungan beberapa komponen:

$$E_{\text{DFT}} = T_{\text{s}} + E_{\text{ne}} + E_{\text{J}} + E_{\text{xc}}$$

dengan:

Simbol	Makna
T_{s}	Energi kinetik sistem elektron noninteraksi
E_{ne}	Energi tarikan elektron-inti
E_{J}	Energi Coulomb klasik antarelekttron
E_{xc}	Energi exchange-correlation

Suku E_{xc} adalah bagian paling penting sekaligus paling sulit. Di dalamnya tersimpan koreksi terhadap exchange dan korelasi elektron yang tidak ditangani secara sederhana oleh suku lain. Karena bentuk eksaknya tidak diketahui, maka digunakan pendekatan fungsional.

Dalam praktik, pilihan fungsional menentukan karakter hasil. Misalnya, fungsional hybrid seperti B3LYP memasukkan sebagian exchange Hartree–Fock. Fungsional GGA seperti PBE menggunakan informasi kerapatan elektron dan gradiennya. Fungsional meta-GGA menambahkan informasi lebih lanjut seperti kerapatan energi kinetik. Fungsional range-separated mencoba memperlakukan interaksi jarak pendek dan jarak jauh secara berbeda.

Mahasiswa tidak perlu menguasai seluruh teori fungsional secara matematis pada Praktikum 4. Namun, mahasiswa perlu memahami bahwa hasil DFT tidak bebas dari pilihan fungsional. Oleh karena itu, laporan praktikum harus selalu menyebutkan fungsional yang digunakan.

4. Energi Orbital dalam DFT

Dalam Praktikum 4, mahasiswa akan mengambil energi HOMO dan LUMO dari output perhitungan. Energi orbital ini biasanya diperoleh dari orbital Kohn–Sham jika perhitungan dilakukan dengan DFT. Di sinilah mahasiswa harus berhati-hati.

Dalam Hartree–Fock, energi orbital memiliki hubungan konseptual tertentu dengan teorema Koopmans, meskipun tetap merupakan pendekatan. Dalam DFT, orbital Kohn–Sham terutama merupakan alat untuk menghasilkan kerapatan elektron. Energi orbital Kohn–Sham sering digunakan secara praktis untuk interpretasi, tetapi tidak semua energi orbital Kohn–Sham dapat diperlakukan sebagai observabel langsung.

Meskipun demikian, energi HOMO dan LUMO dari DFT sangat sering digunakan secara kualitatif dalam kimia komputasi. Energi tersebut membantu membandingkan kecenderungan donor-aksetor

elektron, gap elektronik, dan reaktivitas relatif antarmolekul. Dalam praktikum ini, energi orbital digunakan sebagai indikator pembelajaran, bukan sebagai prediksi eksperimental mutlak.

Dengan demikian, prinsip yang harus dipegang adalah:

Energi HOMO-LUMO berguna untuk interpretasi reaktivitas, tetapi harus dibaca sebagai indikator model, bukan sebagai kebenaran tunggal yang berdiri sendiri.

Mahasiswa harus mencatat metode dengan lengkap:

```
Molekul      : butadiena
Metode       : DFT
Fungsional   : B3LYP
Basis set    : 6-31G(d)
Software     : ORCA / GAMESS / Gaussian / ChemCompute
Job          : optimasi geometri dan perhitungan orbital
```

Tanpa informasi tersebut, nilai HOMO dan LUMO tidak dapat dibandingkan secara ilmiah.

5. HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital

HOMO adalah singkatan dari **Highest Occupied Molecular Orbital**, yaitu orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Karena HOMO merupakan orbital terisi paling tinggi energinya, elektron pada orbital ini relatif paling mudah terlibat dalam proses donasi elektron dibanding elektron pada orbital terisi yang lebih rendah.

Dalam teori orbital frontier, HOMO sering dikaitkan dengan kemampuan molekul bertindak sebagai **donor elektron**. Molekul dengan energi HOMO lebih tinggi cenderung lebih mudah menyumbangkan elektron, meskipun kesimpulan tersebut tetap harus dikaitkan dengan konteks reaksi.

Secara sederhana:

```
HOMO tinggi
→ elektron relatif lebih mudah dilepaskan atau didonasikan
→ kecenderungan donor elektron lebih besar
```

Dalam kimia organik, konsep HOMO membantu menjelaskan nukleofilisitas, reaksi perisiklik, interaksi donor-akseptor, dan kecenderungan molekul bereaksi dengan spesies elektrofilik. Jika suatu bagian molekul memiliki kontribusi HOMO besar, bagian tersebut dapat menjadi pusat donor elektron dalam konteks reaksi tertentu.

Contoh pada molekul model:

- Pada **etilena**, HOMO berkaitan dengan orbital π ikatan rangkap $C=C$.

- Pada **butadiena**, HOMO menyebar pada sistem π terkonjugasi.
- Pada **benzena**, HOMO terkait dengan sistem π aromatik.
- Pada **formaldehida**, HOMO dapat berkaitan dengan pasangan elektron bebas atau orbital terisi yang relevan pada gugus karbonil.
- Pada **nitrobenzena**, distribusi HOMO dipengaruhi oleh cincin aromatik dan gugus nitro sebagai substituen penarik elektron.

Visualisasi HOMO penting karena nilai energi saja belum menunjukkan lokasi donor elektron. Bentuk orbital menunjukkan bagian molekul yang memiliki kontribusi besar terhadap orbital tersebut.

6. LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital

LUMO adalah singkatan dari **Lowest Unoccupied Molecular Orbital**, yaitu orbital molekul kosong dengan energi terendah. Karena LUMO merupakan orbital kosong paling rendah energinya, orbital ini sering dianggap sebagai tempat paling mudah menerima elektron.

Dalam teori orbital frontier, LUMO sering dikaitkan dengan kemampuan molekul bertindak sebagai **akseptor elektron**. Molekul dengan energi LUMO lebih rendah cenderung lebih mudah menerima elektron dari donor, meskipun interpretasi ini tetap harus dikaitkan dengan mekanisme dan kondisi reaksi.

Secara sederhana:

LUMO rendah
 → lebih mudah menerima elektron
 → kecenderungan akseptor elektron lebih besar

Contoh penting adalah **formaldehida**. Gugus karbonil memiliki orbital antibonding π^* yang berperan sebagai LUMO penting dalam reaksi adisi nukleofilik. Nukleofil dapat mendonorkan pasangan elektron ke orbital π^* karbonil. Oleh karena itu, visualisasi LUMO formaldehida membantu mahasiswa memahami mengapa karbon karbonil menjadi pusat elektrofilik.

Pada **nitrobenzena**, gugus nitro dapat menarik kerapatan elektron dan memengaruhi distribusi LUMO. Hal ini membantu menjelaskan peran gugus nitro sebagai substituen penarik elektron dan pengaruhnya terhadap reaktivitas cincin aromatik.

Namun, seperti HOMO, LUMO bukan satu-satunya penentu reaktivitas. Faktor sterik, muatan, polaritas, pelarut, orientasi orbital, dan energi keadaan transisi tetap penting. LUMO adalah indikator, bukan keputusan final.

7. Teori Orbital Frontier dan Reaktivitas Molekul

Teori orbital frontier dikembangkan untuk menjelaskan reaktivitas kimia berdasarkan interaksi antara orbital terisi tertinggi dan orbital kosong terendah. Dalam pendekatan ini, reaksi sering dianalisis melalui interaksi antara HOMO dari satu spesies dan LUMO dari spesies lain.

Secara umum:

donor elektron

→ memberikan elektron dari HOMO

akseptor elektron

→ menerima elektron ke LUMO

Interaksi paling efektif terjadi ketika energi HOMO donor dan LUMO akseptor relatif dekat serta simetri orbital memungkinkan tumpang tindih yang baik. Konsep ini banyak digunakan dalam kimia organik, terutama untuk memahami reaksi perisiklik, reaksi Diels–Alder, adisi nukleofilik, reaksi elektrofilik, dan interaksi donor-akseptor.

Dalam Praktikum 4, teori orbital frontier digunakan secara sederhana untuk menafsirkan molekul model. Mahasiswa tidak diminta menghitung mekanisme reaksi secara penuh, tetapi memahami bahwa HOMO dan LUMO dapat memberi petunjuk tentang bagian molekul yang cenderung menyumbang atau menerima elektron.

Contoh:

Butadiena memiliki sistem π terkonjugasi.

Delokalisasi π memperkecil pemisahan tingkat energi.

Akibatnya, gap HOMO-LUMO dapat lebih kecil daripada etilena.

Contoh lain:

Formaldehida memiliki gugus karbonil.

LUMO π^* karbonil dapat menerima elektron dari nukleofil.

Karena itu, formaldehida dapat dianalisis sebagai akseptor elektron pada pusat karbonil.

Teori orbital frontier membantu mahasiswa menghubungkan data komputasi dengan penalaran reaktivitas.

8. Gap HOMO-LUMO

Gap HOMO-LUMO adalah selisih energi antara LUMO dan HOMO. Rumusnya:

$$\text{Gap} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

Jika energi HOMO dan LUMO dinyatakan dalam eV, maka gap juga dalam eV. Jika energi masih dalam Hartree, mahasiswa perlu mengonversi ke eV bila ingin menyajikan dalam satuan yang lebih umum untuk energi orbital.

Gap HOMO-LUMO sering digunakan sebagai indikator global stabilitas elektronik dan reaktivitas. Secara kualitatif:

Gap HOMO-LUMO	Interpretasi Umum
Besar	Molekul relatif lebih stabil secara elektronik, kurang mudah mengalami eksitasi
Kecil	Molekul relatif lebih mudah mengalami transisi elektronik atau interaksi donor-aksetor
Menurun karena konjugasi	Delokalisasi elektron meningkat
Dipengaruhi substituen	Gugus donor atau penarik elektron mengubah energi orbital

Namun, gap HOMO-LUMO harus ditafsirkan hati-hati. Gap kecil tidak otomatis berarti molekul akan bereaksi dalam semua kondisi. Gap besar tidak otomatis berarti molekul inert total. Reaktivitas kimia adalah hasil dari banyak faktor.

Contoh interpretasi yang tepat:

Butadiena memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada etilena karena sistem π pada butadiena lebih terdelokalisasi. Delokalisasi ini memperkecil pemisahan energi antara orbital terisi dan orbital kosong.

Contoh interpretasi yang terlalu berlebihan:

Butadiena pasti selalu lebih reaktif daripada etilena dalam semua reaksi karena gap-nya lebih kecil.

Pernyataan kedua tidak tepat karena mengabaikan mekanisme reaksi, kondisi eksperimen, dan faktor lain.

9. Donor Elektron dan Akseptor Elektron

Dalam analisis reaktivitas, istilah **donor elektron** dan **akseptor elektron** sangat penting. Donor elektron adalah spesies atau bagian molekul yang cenderung menyumbangkan kerapatan elektron. Akseptor elektron adalah spesies atau bagian molekul yang cenderung menerima kerapatan elektron.

Dalam konteks HOMO-LUMO:

Donor elektron
→ berkaitan dengan HOMO

Akseptor elektron
→ berkaitan dengan LUMO

Molekul dengan HOMO tinggi cenderung lebih mudah menyumbangkan elektron. Molekul dengan LUMO rendah cenderung lebih mudah menerima elektron. Namun, reaktivitas donor-akseptor tidak hanya ditentukan oleh energi orbital. Bentuk orbital juga penting. Jika HOMO dan LUMO tidak memiliki tumpang tindih spasial yang baik, interaksi orbital dapat menjadi lemah meskipun energinya tampak sesuai.

Contoh:

- **Etilena** dapat bertindak sebagai donor π dalam reaksi dengan elektrofil.
- **Formaldehida** dapat bertindak sebagai akseptor melalui orbital π^* karbonil.
- **Nitrobenzena** memiliki gugus nitro yang menarik elektron dan memengaruhi kemampuan cincin dalam reaksi aromatik.

Dengan memahami donor dan akseptor elektron, mahasiswa dapat menghubungkan kimia organik dengan data orbital dari perhitungan DFT.

10. Konjugasi dan Delokalisasi Elektron

Konjugasi adalah keadaan ketika orbital p bersebelahan saling berinteraksi sehingga elektron π dapat terdelokalisasi pada beberapa atom. Delokalisasi elektron mengubah pola energi orbital. Semakin panjang sistem konjugasi, semakin banyak orbital π yang terbentuk dan semakin rapat tingkat energinya. Akibatnya, gap HOMO-LUMO dapat mengecil.

Contoh utama dalam Praktikum 4 adalah perbandingan **etilena** dan **butadiena**.

Etilena:

$\text{CH}_2=\text{CH}_2$
satu ikatan π
sistem π pendek
gap relatif lebih besar

Butadiena:

$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$
dua ikatan π terkonjugasi
delokalisasi π lebih luas
gap relatif lebih kecil

Konsep ini juga dapat diperluas ke benzena. Benzena memiliki enam elektron π yang terdelokalisasi dalam cincin aromatik. Delokalisasi ini memberi stabilitas aromatik dan memengaruhi energi orbital. Namun, benzena tidak boleh dipahami hanya sebagai “butadiena yang

lebih panjang”, karena aromaticitas memiliki karakter khusus yang berkaitan dengan simetri, jumlah elektron π , dan kestabilan cincin.

Dalam praktikum, visualisasi HOMO dan LUMO pada etilena, butadiena, dan benzena membantu mahasiswa melihat bagaimana delokalisasi orbital berubah dari sistem sederhana ke sistem terkonjugasi dan aromatik.

11. Substituen dan Pengaruh Elektronik

Substituen dapat memengaruhi distribusi elektron melalui efek induktif dan resonansi. Dalam Praktikum 4, nitrobenzena digunakan untuk mempelajari pengaruh gugus nitro terhadap struktur elektronik cincin aromatik.

Gugus nitro $-\text{NO}_2$ dikenal sebagai gugus penarik elektron. Ia dapat menarik kerapatan elektron melalui efek induktif karena atom O sangat elektronegatif, dan melalui efek resonansi karena gugus nitro dapat berinteraksi dengan sistem π cincin benzena. Akibatnya, distribusi elektron pada nitrobenzena berbeda dari benzena.

Dalam analisis HOMO-LUMO, mahasiswa dapat memperhatikan:

1. Apakah HOMO lebih banyak berada pada cincin atau gugus nitro?
2. Apakah LUMO memiliki kontribusi besar pada gugus nitro?
3. Bagaimana gugus nitro mengubah gap dibanding benzena?
4. Bagaimana perubahan orbital mendukung pemahaman nitrobenzena sebagai cincin aromatik yang lebih miskin elektron?

Contoh interpretasi:

Gugus nitro pada nitrobenzena menarik kerapatan elektron dari cincin aromatik. Visualisasi LUMO dapat menunjukkan kontribusi orbital pada gugus nitro, yang mendukung sifat gugus nitro sebagai akseptor elektron.

Analisis substituen ini penting karena menghubungkan komputasi molekul dengan konsep reaktivitas aromatik dalam kimia organik.

12. Parameter Reaktivitas Global

Selain gap HOMO-LUMO, Praktikum 4 juga menggunakan beberapa parameter reaktivitas global sederhana. Parameter ini dihitung dari energi HOMO dan LUMO. Meskipun bersifat pendekatan, parameter ini berguna untuk membandingkan kecenderungan umum molekul.

Parameter yang digunakan:

$$\text{Gap} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\text{Hardness } (\eta) = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}) / 2$$

$$\text{Softness } (S) = 1 / \eta$$

$$\text{Elektronegativitas Mulliken } (\chi) = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$$

$$\text{Indeks elektrofilitas } (\omega) = \chi^2 / (2\eta)$$

Makna ringkas:

Parameter	Makna Konseptual
Gap	Selisih energi orbital frontier
Hardness	Resistensi molekul terhadap perubahan distribusi elektron
Softness	Kemudahan distribusi elektron berubah
Elektronegativitas Mulliken	Kecenderungan menarik elektron secara global
Elektrofilitas	Kecenderungan menerima elektron secara global

Hardness dan softness terkait dengan prinsip hard-soft acid-base. Molekul dengan hardness besar cenderung lebih sulit mengalami perubahan kerapatan elektron. Molekul dengan softness besar cenderung lebih mudah mengalami perubahan distribusi elektron. Elektronegativitas Mulliken menghubungkan energi HOMO-LUMO dengan kecenderungan menarik elektron. Indeks elektrofilitas membantu menilai kemampuan molekul menerima elektron secara global.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa parameter ini adalah indikator global. Ia tidak selalu menunjukkan lokasi reaksi. Untuk mengetahui lokasi yang lebih spesifik, diperlukan analisis orbital, muatan atomik, fungsi Fukui, atau analisis lokal lain. Dalam Praktikum 4, parameter global digunakan sebagai latihan awal.

13. Stabilitas, Reaktivitas, dan Batas Interpretasi

Hubungan antara gap HOMO-LUMO dan reaktivitas sering disederhanakan sebagai berikut:

gap besar → lebih stabil → kurang reaktif
 gap kecil → kurang stabil → lebih reaktif

Penyederhanaan ini berguna untuk pembelajaran awal, tetapi tidak boleh dipakai secara mutlak. Stabilitas dan reaktivitas memiliki banyak dimensi. Molekul dapat stabil secara termodinamika tetapi reaktif dalam kondisi tertentu. Molekul dapat memiliki gap kecil tetapi tidak bereaksi karena hambatan sterik atau mekanisme tidak mendukung. Molekul dapat memiliki LUMO rendah tetapi tidak mudah diserang jika pusat reaktif terlindung.

Karena itu, interpretasi yang lebih tepat adalah:

Gap HOMO-LUMO memberikan indikator elektronik global tentang kecenderungan stabilitas dan reaktivitas, tetapi harus ditafsirkan bersama struktur molekul, distribusi orbital, substituen, polaritas, dan mekanisme reaksi.

Dalam laporan, mahasiswa harus menghindari pernyataan absolut. Gunakan istilah seperti “cenderung”, “dapat menunjukkan”, “dalam data praktikum ini”, “secara kualitatif”, dan “perlu ditafsirkan dengan hati-hati”.

14. Contoh Analisis Konseptual Molekul Model

Etilena digunakan sebagai model sistem π paling sederhana. HOMO dan LUMO etilena berkaitan dengan orbital π dan π^* . Gap etilena menjadi acuan dasar untuk membandingkan efek konjugasi.

Butadiena menunjukkan bahwa konjugasi memperluas delokalisasi π . Dibanding etilena, butadiena biasanya memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil karena tingkat energi orbital π menjadi lebih rapat.

Benzena memperkenalkan aromaticitas. Delokalisasi enam elektron π dalam cincin memberi kestabilan khusus. Visualisasi orbital membantu mahasiswa melihat karakter π aromatik.

Formaldehida memperkenalkan gugus karbonil. LUMO formaldehida sering dikaitkan dengan orbital π^* C=O yang penting dalam adisi nukleofilik. Molekul ini membantu mahasiswa memahami akseptor elektron.

Nitrobenzena memperkenalkan efek substituen penarik elektron. Gugus nitro memengaruhi distribusi elektron cincin dan dapat menurunkan kecenderungan cincin sebagai donor elektron. Visualisasi orbital membantu menjelaskan pengaruh substituen secara lebih konkret.

Kelima molekul ini membentuk urutan pembelajaran yang logis: dari ikatan π sederhana, konjugasi, aromaticitas, gugus karbonil, sampai efek substituen penarik elektron.

15. Implikasi Teori bagi Praktikum

Dasar teori dalam subbab ini memiliki implikasi langsung bagi pelaksanaan praktikum.

Pertama, mahasiswa harus menjalankan perhitungan dengan metode dan basis set yang jelas. Nilai HOMO-LUMO tidak boleh dicatat tanpa informasi fungsional, basis set, software, geometri, dan status perhitungan.

Kedua, mahasiswa harus memvisualisasikan orbital, bukan hanya mencatat energi. Bentuk orbital membantu menunjukkan lokasi donor dan akseptor elektron.

Ketiga, mahasiswa harus menghitung gap dan parameter reaktivitas global secara sistematis. Python digunakan agar perhitungan konsisten dan mudah diperiksa.

Keempat, mahasiswa harus membandingkan molekul model berdasarkan konsep kimia, bukan hanya angka. Butadiena dibandingkan dengan etilena untuk melihat efek konjugasi. Nitrobenzena dibandingkan dengan benzena untuk melihat efek substituen. Formaldehida dianalisis untuk melihat peran gugus karbonil.

Kelima, mahasiswa harus menyadari batas analisis. HOMO-LUMO memberikan indikator reaktivitas, tetapi bukan pengganti analisis mekanisme reaksi secara lengkap.

16. Transisi ke Software yang Digunakan

Subbab 7.2 telah membahas dasar teori Praktikum 4: Density Functional Theory, energi orbital, HOMO, LUMO, gap HOMO-LUMO, donor elektron, akseptor elektron, konjugasi, substituen, parameter reaktivitas global, dan batas interpretasi reaktivitas molekul.

Subbab berikutnya akan membahas software yang digunakan. Pada subbab 7.3, pembahasan akan diarahkan pada ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol, dan Python. Setiap software memiliki peran berbeda: membangun struktur molekul, menjalankan DFT, mengambil energi orbital, memvisualisasikan HOMO-LUMO, dan menganalisis data reaktivitas. Dengan dasar teori yang telah dijelaskan, mahasiswa akan lebih siap memahami mengapa setiap software diperlukan dalam workflow Praktikum 4.

7.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 4 dipilih untuk mendukung tiga kegiatan utama: **perhitungan DFT**, **visualisasi HOMO-LUMO**, dan **analisis reaktivitas molekul**. Ketiganya tidak selalu dapat dilakukan dengan satu software saja. Ada software yang berperan sebagai platform komputasi berbasis web, ada yang berperan sebagai mesin perhitungan struktur elektronik, ada yang berperan sebagai pembangun struktur molekul, ada yang khusus kuat untuk visualisasi orbital, dan ada pula yang digunakan untuk analisis numerik berbasis data.

Software yang digunakan dalam Praktikum 4 adalah:

1. **ChemCompute**
2. **ORCA**
3. **GAMESS**
4. **Gaussian**
5. **Avogadro**
6. **Gabedit**
7. **Molden**
8. **Jmol**
9. **Python**

Pemilihan software tersebut mencerminkan workflow praktikum kimia komputasi modern. Mahasiswa tidak hanya diminta menjalankan satu program, tetapi belajar membangun alur kerja ilmiah: membuat struktur molekul, menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris, mengambil energi HOMO dan LUMO, memvisualisasikan orbital molekul, menghitung parameter reaktivitas, membuat grafik, menyimpan CSV, dan menulis interpretasi kimia. Dengan demikian, software dalam subbab ini harus dipahami sebagai bagian dari **ekosistem praktikum**, bukan sebagai daftar alat yang berdiri sendiri.

Dalam konteks pembelajaran, pembagian peran software sangat penting. ChemCompute memudahkan akses komputasi berbasis web untuk pembelajaran dan riset sarjana tanpa instalasi lokal yang rumit. ORCA, GAMESS, dan Gaussian dapat menjalankan perhitungan struktur elektronik, termasuk DFT. Avogadro membantu membangun dan memeriksa struktur molekul. Gabedit, Molden, dan Jmol membantu visualisasi hasil, terutama struktur dan orbital molekul. Python digunakan untuk analisis data HOMO-LUMO dan parameter reaktivitas global. ChemCompute sendiri menjelaskan platformnya sebagai sarana computational chemistry untuk pengajaran sarjana dan riset tanpa perlu kompilasi, instalasi, serta pemeliharaan software dan hardware lokal. (chemcompute.org)

1. Prinsip Pemilihan Software pada Praktikum 4

Praktikum 4 memiliki karakter yang berbeda dari praktikum sebelumnya. Pada Bab 6, perhatian utama adalah hubungan antara Hartree–Fock, basis set, energi total, dan biaya komputasi. Pada Bab 7, perhatian bergeser ke **struktur elektronik frontier** dan **reaktivitas molekul**. Oleh karena itu, software yang digunakan harus mendukung beberapa kebutuhan berikut:

Kebutuhan Praktikum	Software yang Relevan
Membangun struktur molekul	Avogadro, Gabedit
Menjalankan perhitungan DFT	ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian
Mengambil energi HOMO-LUMO	ORCA, GAMESS, Gaussian, ChemCompute
Membuat file orbital atau cube	ORCA, Gaussian, GAMESS, Gabedit
Memvisualisasikan orbital	Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol
Mengolah data HOMO-LUMO	Python
Membuat grafik dan diagram energi	Python

Dari tabel tersebut tampak bahwa tidak ada satu software yang selalu mencakup semua tahap dengan cara paling mudah. Dalam praktikum dasar, alur paling sederhana dapat dibuat sebagai berikut:

Avogadro
 → membuat struktur molekul
 → ChemCompute/GAMESS atau ORCA
 → menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris
 → mengambil energi HOMO dan LUMO
 → Molden/Jmol/Gabedit
 → memvisualisasikan orbital
 → Python

→ menghitung gap dan parameter reaktivitas

Alur tersebut mengajarkan bahwa kimia komputasi bukan hanya menekan tombol “run”. Praktikum kimia komputasi adalah proses berpikir sistematis yang menghubungkan input, metode, output, visualisasi, analisis, dan kesimpulan.

2. ChemCompute sebagai Platform Web Praktikum

ChemCompute digunakan sebagai platform web yang memudahkan mahasiswa menjalankan perhitungan kimia komputasi tanpa harus menginstal software berat di komputer masing-masing. Dalam Praktikum 4, ChemCompute dapat menjadi jalur awal untuk menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris, mengunduh output, dan mengambil data energi orbital.

Peran ChemCompute dalam Praktikum 4 meliputi:

1. Menyediakan akses berbasis web untuk menjalankan perhitungan.
2. Memudahkan mahasiswa menggunakan paket komputasi tanpa instalasi lokal.
3. Mendukung pembelajaran kelas besar yang memiliki variasi kemampuan teknis.
4. Memungkinkan mahasiswa memperoleh output energi dan orbital untuk dianalisis.
5. Menjadi jembatan bagi mahasiswa pemula sebelum memakai software lokal seperti ORCA atau Gaussian.

ChemCompute juga menyediakan akses ke paket seperti GAMESS melalui servernya; halaman GAMESS pada ChemCompute menjelaskan bahwa pengguna dapat mengirim job GAMESS ke server untuk mempermudah perhitungan kimia kuantum. (chemcompute.org)

Namun, ChemCompute harus dipahami sebagai **platform**, bukan metode. Jika mahasiswa menulis “perhitungan dilakukan dengan ChemCompute”, pernyataan itu belum lengkap. Penulisan yang lebih baik adalah:

Perhitungan dilakukan melalui ChemCompute menggunakan GAMESS dengan metode DFT, fungsional B3LYP, dan basis set 6-31G(d).

Pernyataan tersebut lebih lengkap karena menyebut platform, mesin perhitungan, metode, fungsional, dan basis set. Dalam laporan Praktikum 4, mahasiswa harus selalu membedakan antara **platform**, **software komputasi**, **metode**, **fungsional**, dan **basis set**.

3. ORCA sebagai Mesin Perhitungan DFT

ORCA merupakan salah satu software struktur elektronik yang sangat relevan untuk Praktikum 4. Manual ORCA menyebut ORCA sebagai paket **ab initio**, **DFT**, dan **semiempirical SCF-MO**, sehingga sesuai untuk menjalankan perhitungan DFT, menghitung energi orbital, dan

menghasilkan data yang dapat digunakan untuk analisis HOMO-LUMO. (orca-manual.mpi-muelheim.mpg.de)

Dalam Praktikum 4, ORCA dapat digunakan untuk:

1. Optimasi geometri molekul model.
2. Perhitungan DFT single point.
3. Pengambilan energi orbital.
4. Pembuatan file orbital atau file visualisasi.
5. Analisis HOMO-LUMO pada molekul organik kecil.
6. Pembuatan output yang dapat dibaca oleh software visualisasi lain.

Contoh input ORCA sederhana untuk perhitungan DFT etilena:

```
! B3LYP 6-31G(d) Opt

* xyz 0 1
C    0.000000    0.000000    0.000000
C    1.340000    0.000000    0.000000
H   -0.540000    0.930000    0.000000
H   -0.540000   -0.930000    0.000000
H    1.880000    0.930000    0.000000
H    1.880000   -0.930000    0.000000
*
```

Bagian `B3LYP` menunjukkan fungsional DFT. Bagian `6-31G(d)` menunjukkan basis set. Kata `Opt` menunjukkan bahwa job yang dijalankan adalah optimasi geometri. Baris `xyz 0 1` menunjukkan koordinat Cartesian, muatan total 0, dan multiplicity 1.

Jika mahasiswa ingin mengambil energi orbital dari output, mereka harus mencari bagian yang memuat orbital energies atau molecular orbital information. Untuk visualisasi orbital, output ORCA dapat diproses lebih lanjut menggunakan utilitas pendukung atau dikonversi menjadi format yang dapat dibaca oleh program visualisasi.

Kelebihan ORCA adalah fleksibel, kuat, dan banyak digunakan untuk perhitungan DFT. Keterbatasannya bagi mahasiswa pemula adalah kebutuhan instalasi lokal, penggunaan terminal, dan pemahaman file input-output. Oleh karena itu, ORCA lebih cocok untuk kelas menengah atau kelas yang telah terbiasa dengan workflow berbasis file.

4. GAMESS sebagai Alternatif Perhitungan Struktur Elektronik

GAMESS atau **General Atomic and Molecular Electronic Structure System** merupakan paket kimia kuantum ab initio umum. Situs resmi GAMESS menjelaskan bahwa GAMESS adalah paket kimia kuantum ab initio umum yang dikelola oleh Gordon Research Group di Iowa State University. (msg.chem.iastate.edu) GAMESS juga dapat menjalankan DFT dan berbagai metode

struktur elektronik lain; Ames Laboratory menjelaskan GAMESS sebagai kode struktur elektronik umum yang dapat melakukan DFT, semiempiris, QM/MM, dan efek pelarut. (ameslab.gov)

Dalam Praktikum 4, GAMESS dapat digunakan melalui ChemCompute atau instalasi lokal. Peran GAMESS meliputi:

1. Menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris.
2. Menghasilkan output energi orbital.
3. Menjadi mesin perhitungan pada jalur ChemCompute.
4. Memberikan pengalaman membaca output kimia kuantum yang lengkap.
5. Menjadi alternatif jika ORCA atau Gaussian tidak tersedia.

GAMESS cocok untuk pembelajaran karena dapat diakses melalui ChemCompute dan memiliki output yang kaya informasi. Namun, output GAMESS sering panjang dan teknis. Mahasiswa harus diarahkan untuk mencari bagian yang relevan: metode, basis set, energi total, orbital energies, status konvergensi, dan informasi file visualisasi jika tersedia.

Dalam laporan, mahasiswa tidak cukup menulis:

Software: GAMESS

Penulisan yang lebih lengkap adalah:

Software: GAMESS melalui ChemCompute
 Metode: DFT
 Fungsional: B3LYP
 Basis set: 6-31G(d)
 Molekul: butadiena
 Data yang diambil: energi HOMO, energi LUMO, dan gap HOMO-LUMO

Dengan format seperti itu, hasil menjadi lebih dapat dievaluasi.

5. Gaussian sebagai Software Struktur Elektronik Komersial

Gaussian merupakan salah satu software struktur elektronik komersial yang sangat dikenal dalam kimia komputasi. Situs resmi Gaussian menyatakan bahwa Gaussian berkaitan dengan theoretical and computational chemistry dan menyediakan program untuk kebutuhan kimia komputasi. (gaussian.com) Dalam Praktikum 4, Gaussian dapat digunakan jika institusi memiliki lisensi resmi.

Gaussian relevan untuk Praktikum 4 karena dapat digunakan untuk:

1. Optimasi geometri dengan DFT.
2. Perhitungan energi orbital.
3. Pembuatan file checkpoint.

4. Pembuatan file cube untuk visualisasi orbital.
5. Visualisasi lanjutan jika dipasangkan dengan GaussView atau software lain.
6. Analisis molekul organik seperti etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena.

Contoh input Gaussian sederhana untuk formaldehida:

```
%chk=formaldehida_b3lyp.chk
# B3LYP/6-31G(d) Opt Pop=Full

Formaldehida DFT HOMO LUMO

0 1
C      0.000000      0.000000      0.000000
O      1.210000      0.000000      0.000000
H     -0.600000      0.930000      0.000000
H     -0.600000     -0.930000      0.000000
```

Bagian B3LYP/6-31G(d) menunjukkan fungsional dan basis set. Opt menunjukkan optimasi geometri. Pop=Full dapat membantu menampilkan informasi orbital yang lebih lengkap, bergantung kebutuhan dan versi software.

Kelebihan Gaussian adalah dokumentasi luas, integrasi dengan perangkat visualisasi, dan penggunaan luas dalam penelitian. Keterbatasannya adalah sifat komersial dan kebutuhan lisensi resmi. Dalam konteks pendidikan, mahasiswa harus memahami etika penggunaan software. Software berlisensi tidak boleh digunakan secara ilegal.

6. Avogadro sebagai Editor dan Visualisasi Molekul

Avogadro digunakan untuk membangun struktur molekul awal, memeriksa geometri, menambahkan hidrogen, dan menyiapkan file struktur. Dokumentasi Avogadro 2 menyebut Avogadro sebagai editor dan alat visualisasi molekul yang bebas dan open-source, digunakan dalam kimia komputasi, pemodelan molekul, pendidikan kimia, bioinformatika, dan bidang terkait. (two.avogadro.cc) Artikel Avogadro dalam *Journal of Cheminformatics* juga menjelaskan Avogadro sebagai editor dan visualizer molekul lintas platform yang dapat digunakan untuk membangun struktur molekul, memformat input, dan menganalisis output berbagai paket kimia komputasi. ([Springer](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2016-08-00000))

Dalam Praktikum 4, Avogadro berperan pada tahap awal dan tahap visual:

1. Membangun struktur etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena.
2. Menambahkan atom hidrogen secara otomatis.
3. Memeriksa kewajaran geometri awal.
4. Menyimpan file dalam format XYZ, MOL, atau format lain.
5. Membuka hasil optimasi untuk melihat perubahan geometri.
6. Menjadi alat bantu visualisasi orbital jika format output mendukung.

Avogadro sangat cocok untuk mahasiswa pemula karena antarmukanya relatif intuitif. Namun, mahasiswa tidak boleh hanya percaya pada tampilan visual. Struktur harus tetap diperiksa: jumlah atom, valensi, hidrogen, muatan, multiplicity, dan kewajaran geometri. Molekul yang terlihat “indah” belum tentu benar secara kimia.

Contoh peran Avogadro pada nitrobenzena:

```
membangun cincin benzena
→ menambahkan gugus nitro
→ memeriksa semua hidrogen
→ melakukan clean geometry awal
→ menyimpan file XYZ
→ digunakan sebagai input DFT
```

Dalam workflow Praktikum 4, Avogadro menjadi jembatan antara konsep struktur kimia dan input komputasi.

7. Gabedit sebagai Antarmuka Preprocessing dan Postprocessing

Gabedit adalah graphical user interface untuk berbagai paket kimia komputasi. Situs Gabedit menjelaskan bahwa Gabedit dapat digunakan sebagai antarmuka untuk paket seperti GAMESS-US, Gaussian, Molcas, Molpro, MOPAC, ORCA, PC-GAMESS, dan Q-Chem, serta dapat menampilkan berbagai hasil perhitungan dan mendukung banyak format molekul. (gabedit.sourceforge.net) Artikel Allouche juga menjelaskan Gabedit sebagai antarmuka grafis freeware yang menyediakan preprocessing dan postprocessing untuk berbagai software kimia komputasi. ([PubMed](#))

Dalam Praktikum 4, Gabedit dapat berperan sebagai:

1. Pembangun struktur molekul.
2. Pembuat input untuk beberapa software.
3. Pembaca output komputasi.
4. Alat visualisasi struktur molekul.
5. Alat visualisasi orbital molekul bila data tersedia.
6. Alat penghubung antara software perhitungan dan analisis visual.

Gabedit sangat berguna ketika mahasiswa perlu memahami bahwa input-output software kimia komputasi dapat diproses dengan alat bantu grafis. Bagi mahasiswa yang belum terbiasa dengan terminal, Gabedit membantu mengurangi hambatan teknis. Namun, seperti software grafis lainnya, Gabedit tidak boleh membuat mahasiswa berhenti membaca output. Visualisasi hanya membantu, sedangkan validasi tetap harus merujuk pada file output.

Contoh penggunaan Gabedit:

```
membuka output Gaussian atau GAMESS
→ memeriksa energi orbital
```

- menampilkan orbital HOMO
- menampilkan orbital LUMO
- menyimpan gambar orbital untuk laporan

Gabedit dapat menjadi alternatif visualisasi jika Molden atau Jmol tidak tersedia.

8. Molden sebagai Software Visualisasi Orbital Molekul

Molden adalah program visualisasi yang sangat relevan untuk Praktikum 4 karena mampu menampilkan orbital molekul, kerapatan elektron, dan informasi molekul dari berbagai output ab initio. Situs Molden menjelaskan bahwa Molden dapat menampilkan molecular orbitals, electron density, dan molecular minus atomic density, serta membaca informasi dari output GAMESS dan Gaussian. (theochem.ru.nl)

Dalam Praktikum 4, Molden berperan terutama sebagai alat visualisasi orbital. Mahasiswa dapat menggunakannya untuk melihat bentuk HOMO dan LUMO dari molekul model. Visualisasi ini penting karena energi orbital saja tidak cukup. Bentuk orbital menunjukkan lokasi orbital pada molekul: apakah berada pada ikatan π , pada gugus karbonil, pada gugus nitro, atau tersebar pada sistem aromatik.

Peran Molden:

1. Membuka file output atau format Molden.
2. Menampilkan struktur molekul.
3. Menampilkan orbital HOMO dan LUMO.
4. Memeriksa distribusi orbital pada sistem π .
5. Membantu membuat gambar orbital untuk laporan.
6. Membantu membandingkan orbital etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena.

Contoh analisis dengan Molden:

```
membuka output butadiena
→ memilih orbital HOMO
→ mengamati delokalisasi pada empat atom C
→ memilih orbital LUMO
→ membandingkan pola fase orbital
→ mengaitkan delokalisasi dengan gap HOMO-LUMO
```

Mahasiswa harus memperhatikan bahwa warna orbital biasanya menunjukkan fase orbital, bukan muatan positif dan negatif. Ini kesalahan umum. Dua warna pada orbital menunjukkan tanda atau fase fungsi gelombang orbital, bukan distribusi muatan formal.

9. Jmol sebagai Viewer Molekul dan Orbital

Jmol adalah viewer struktur molekul 3D yang bebas dan open-source. Situs resmi Jmol menyebut Jmol sebagai viewer struktur molekul open-source yang berguna bagi siswa, pendidik, dan peneliti dalam kimia, biokimia, serta bidang yang berhubungan dengan struktur molekul. (jmol.sourceforge.net) Dalam konteks Praktikum 4, Jmol dapat digunakan untuk menampilkan struktur molekul dan, jika data tersedia, menampilkan isosurface orbital molekul.

Peran Jmol dalam Praktikum 4:

1. Menampilkan struktur molekul secara 3D.
2. Membantu visualisasi molekul model.
3. Menampilkan orbital jika file yang dibutuhkan tersedia.
4. Membantu pembuatan gambar untuk laporan.
5. Menjadi alternatif viewer ringan.

Jmol bermanfaat karena dapat digunakan dalam konteks pendidikan dan visualisasi interaktif. Namun, untuk visualisasi orbital, mahasiswa harus memastikan format file dan data orbital tersedia. Tidak semua file struktur biasa memuat informasi orbital. File XYZ hanya memuat posisi atom, bukan koefisien orbital. Untuk menampilkan HOMO-LUMO, diperlukan data orbital dari output atau file khusus seperti cube, molder, atau format lain yang didukung.

Kesalahan umum yang harus dihindari:

membuka file XYZ di Jmol
→ mengira orbital sudah tersedia

File XYZ hanya berisi koordinat atom. Orbital harus berasal dari hasil perhitungan struktur elektronik.

10. Python sebagai Alat Analisis HOMO-LUMO dan Reaktivitas

Python digunakan sebagai alat analisis data. Dalam Praktikum 4, Python tidak hanya menghitung gap HOMO-LUMO, tetapi juga menyusun parameter reaktivitas global, membuat grafik, membuat diagram tingkat energi orbital, dan menyimpan hasil ke CSV. Python menjadi jembatan antara output komputasi dan laporan ilmiah.

Data yang dianalisis dengan Python meliputi:

1. Nama molekul.
2. Metode.
3. Fungsional.
4. Basis set.
5. Energi HOMO.

6. Energi LUMO.
7. Gap HOMO-LUMO.
8. Hardness.
9. Softness.
10. Elektronegativitas Mulliken.
11. Indeks elektrofilisitas.
12. Catatan software dan status perhitungan.

Contoh struktur data sederhana:

```
molekul,metode,fungsional,basis_set,HOMO_eV,LUMO_eV
etilena,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,...
butadiena,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,...
benzena,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,...
formaldehida,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,...
nitrobenzena,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,...
```

Python akan digunakan pada subbab 7.6 untuk menghitung:

```
Gap = E_LUMO - E_HOMO
 $\eta = \text{Gap} / 2$ 
 $S = 1 / \eta$ 
 $\chi = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$ 
 $\omega = \chi^2 / (2\eta)$ 
```

Dengan Python, analisis menjadi reproduibel. Jika data HOMO-LUMO diperbarui, grafik dan tabel dapat dibuat ulang dengan mudah. Hal ini memperkuat literasi data mahasiswa.

11. Perbandingan Peran Software

Peran software dalam Praktikum 4 dapat diringkas sebagai berikut:

Software	Peran Utama	Kelebihan	Keterbatasan
ChemCompute	Platform web	Mudah diakses tanpa instalasi lokal	Bergantung internet dan ketersediaan layanan
ORCA	Mesin DFT lokal/server	Kuat untuk DFT dan orbital	Perlu instalasi dan terminal
GAMESS	Mesin struktur elektronik	Dapat digunakan melalui ChemCompute	Output panjang dan perlu diarahkan
Gaussian	Mesin struktur elektronik komersial	Banyak digunakan, kuat untuk DFT	Memerlukan lisensi resmi
Avogadro	Editor dan viewer molekul	Mudah untuk membangun struktur	Tidak menggantikan validasi output
Gabedit	GUI pre/post-processing	Mendukung banyak paket komputasi	Perlu pemahaman format output
Molden	Visualisasi orbital	Kuat untuk orbital dan density	Perlu file output yang sesuai

Jmol	Viewer molekul 3D	Ringan dan edukatif	Data orbital harus tersedia
Python	Analisis data	Reprodusibel dan fleksibel	Tidak menggantikan perhitungan DFT

Tabel ini menunjukkan bahwa setiap software memiliki fungsi berbeda. Mahasiswa harus memahami posisi setiap software dalam alur praktikum agar tidak mencampur peran. Misalnya, Avogadro membangun struktur, tetapi bukan sumber utama nilai HOMO-LUMO. Python menghitung gap, tetapi nilai HOMO-LUMO berasal dari perhitungan struktur elektronik. Molden menampilkan orbital, tetapi orbitalnya berasal dari output DFT.

12. Workflow Praktikum yang Direkomendasikan

Workflow Praktikum 4 dapat disusun dalam tiga jalur, bergantung fasilitas kelas.

Jalur dasar berbasis ChemCompute:

Avogadro
 → membuat struktur molekul
 → ChemCompute/GAMESS
 → menjalankan DFT atau semiempiris
 → mengambil HOMO dan LUMO
 → mengunduh output
 → Python
 → menghitung gap dan parameter reaktivitas

Jalur menengah berbasis ORCA:

Avogadro
 → membuat struktur XYZ
 → ORCA
 → optimasi DFT
 → output orbital
 → Molden/Gabedit/Jmol
 → visualisasi HOMO-LUMO
 → Python
 → grafik dan CSV

Jalur lanjutan berbasis Gaussian:

Avogadro/GaussView
 → Gaussian DFT
 → checkpoint dan cube file
 → Molden/Gabedit/Jmol
 → visualisasi orbital
 → Python
 → parameter reaktivitas global

Jalur dasar cocok untuk kelas pemula. Jalur menengah cocok untuk mahasiswa yang sudah terbiasa dengan file input dan terminal. Jalur lanjutan cocok jika institusi memiliki lisensi dan fasilitas komputasi yang memadai.

13. Data Minimum yang Harus Dihasilkan Software

Setiap molekul model harus menghasilkan data minimum berikut:

Data	Keterangan
Molekul	Etilena, butadiena, benzena, formaldehida, nitrobenzena
Software	ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, atau lainnya
Metode	DFT atau semiempiris
Fungsional	Misalnya B3LYP, PBE, PBE0, jika DFT
Basis set	Misalnya 6-31G(d), def2-SVP, atau basis lain
Energi HOMO	Dalam eV atau Hartree
Energi LUMO	Dalam eV atau Hartree
Gap HOMO-LUMO	Dihitung dari LUMO – HOMO
File orbital	Jika visualisasi orbital dilakukan
Status perhitungan	Konvergen atau tidak
Gambar orbital	HOMO dan LUMO
File CSV	Hasil analisis Python

Data ini menjadi bahan utama untuk subbab 7.6, 7.8, dan 7.9. Jika salah satu data utama tidak tersedia, mahasiswa harus memberi catatan dalam laporan.

14. Etika Penggunaan Software

Penggunaan software dalam praktikum harus mengikuti etika akademik dan lisensi. Software open-source seperti Avogadro dan Jmol dapat digunakan sesuai lisensinya. ORCA memiliki ketentuan lisensi tersendiri. Gaussian adalah software komersial dan harus digunakan hanya jika institusi memiliki lisensi resmi. ChemCompute digunakan sesuai aturan platformnya. Gabedit dan Molden juga harus digunakan sesuai ketentuan distribusinya.

Etika ini penting karena kimia komputasi bukan hanya soal hasil ilmiah, tetapi juga cara memperoleh hasil. Menggunakan software ilegal atau tidak menyebut software yang sebenarnya digunakan merupakan pelanggaran akademik.

Dalam laporan, mahasiswa harus menulis software secara jujur:

Perhitungan dilakukan dengan ORCA menggunakan fungsional B3LYP dan basis set 6-31G(d).

Jangan menulis software lain hanya karena dianggap lebih “terkenal”. Jika data diperoleh dari ChemCompute/GAMESS, tulislah demikian. Jika visualisasi dilakukan dengan Molden, tulislah Molden. Jika analisis dilakukan dengan Python, tulislah Python.

15. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software

Beberapa kesalahan yang sering terjadi dalam Praktikum 4 adalah:

Kesalahan	Dampak
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Laporan kehilangan ketepatan metodologis
Tidak menyebut fungsional DFT	Hasil DFT tidak dapat dievaluasi
Tidak menyebut basis set	Energi orbital tidak dapat dibandingkan
Membuka file XYZ dan mengira orbital tersedia	Visualisasi HOMO-LUMO gagal atau keliru
Menganggap warna orbital sebagai muatan	Interpretasi fase orbital salah
Tidak memeriksa status konvergensi	Data HOMO-LUMO dapat tidak valid
Mencampur hasil dari software/fungsional berbeda	Perbandingan tidak sebanding
Tidak menyimpan output asli	Data tidak dapat diverifikasi
Menggunakan software tanpa lisensi	Melanggar etika akademik
Menyalin energi orbital dari bagian output yang salah	Gap dan parameter reaktivitas menjadi salah

Kesalahan-kesalahan ini harus diantisipasi sejak awal. Mahasiswa perlu memahami bahwa analisis reaktivitas berbasis HOMO-LUMO hanya valid jika data orbital yang digunakan benar.

16. Implikasi Pedagogis Pemilihan Software

Pemilihan software dalam Praktikum 4 memiliki implikasi pembelajaran yang besar. Mahasiswa belajar bahwa satu pertanyaan kimia dapat dijawab melalui beberapa alat yang saling melengkapi. Avogadro membantu membangun molekul. ORCA, GAMESS, atau Gaussian menghitung struktur elektronik. Molden, Gabedit, dan Jmol membantu melihat orbital. Python membantu mengubah data menjadi parameter dan grafik.

Dengan workflow ini, mahasiswa mengembangkan beberapa literasi sekaligus:

1. **Literasi struktur molekul**, yaitu kemampuan membangun dan memeriksa molekul.
2. **Literasi metode**, yaitu kemampuan memilih DFT, fungsional, dan basis set.
3. **Literasi output**, yaitu kemampuan membaca energi orbital dan status perhitungan.
4. **Literasi visual**, yaitu kemampuan menafsirkan bentuk orbital.
5. **Literasi data**, yaitu kemampuan menghitung gap dan parameter reaktivitas.
6. **Literasi kritis**, yaitu kemampuan membatasi klaim berdasarkan data.

Praktikum 4 menjadi penting karena menghubungkan software dengan penalaran kimia. Mahasiswa tidak hanya mempelajari alat, tetapi mempelajari cara berpikir komputasional dalam kimia.

17. Transisi ke Molekul Model

Subbab 7.3 telah membahas software yang digunakan dalam Praktikum 4: ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol, dan Python. Masing-masing software memiliki peran yang saling melengkapi dalam alur praktikum, mulai dari membangun struktur molekul, menjalankan DFT, mengambil energi HOMO-LUMO, memvisualisasikan orbital, sampai menganalisis reaktivitas global.

Subbab berikutnya akan membahas molekul model yang digunakan, yaitu etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena. Molekul-molekul ini dipilih karena mampu memperlihatkan hubungan antara ikatan π , konjugasi, aromaticitas, gugus karbonil, substituen penarik elektron, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul. Dengan memahami software terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap menjalankan workflow Praktikum 4 secara sistematis.

7.4 Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 4 dipilih untuk memperlihatkan hubungan antara **struktur elektronik**, **HOMO-LUMO**, **konjugasi**, **aromatisitas**, **gugus fungsi**, **substituen**, dan **reaktivitas molekul**. Pemilihan molekul model bukan sekadar memilih senyawa yang mudah dihitung, tetapi menyusun urutan pembelajaran yang memungkinkan mahasiswa membaca perubahan struktur elektronik dari sistem paling sederhana menuju sistem yang lebih kompleks.

Molekul model dalam Praktikum 4 adalah:

1. **Etilena**
2. **Butadiena**
3. **Benzena**
4. **Formaldehida**
5. **Nitrobenzena**

Kelima molekul tersebut mewakili konsep kimia yang saling berkaitan. Etilena memperkenalkan sistem π paling sederhana. Butadiena memperluas pembahasan ke sistem π terkonjugasi. Benzena memperkenalkan delokalisasi aromatik. Formaldehida memperlihatkan gugus karbonil sebagai pusat akseptor elektron. Nitrobenzena menunjukkan pengaruh substituen penarik elektron terhadap distribusi orbital pada cincin aromatik. Dengan urutan ini, mahasiswa dapat memahami bahwa reaktivitas molekul tidak hanya bergantung pada rumus molekul, tetapi juga pada cara elektron tersebar dalam orbital molekul.

Dalam Praktikum 4, molekul model digunakan untuk menjawab pertanyaan-pertanyaan berikut:

Bagaimana bentuk HOMO dan LUMO pada sistem π sederhana?

Bagaimana konjugasi memengaruhi gap HOMO-LUMO?

Mengapa benzena memiliki karakter elektronik khusus?

Bagaimana gugus karbonil memengaruhi LUMO formaldehida?

Bagaimana gugus nitro memengaruhi distribusi elektron pada nitrobenzena?

Dengan demikian, molekul model menjadi sarana untuk menghubungkan teori DFT, teori orbital frontier, kimia organik, dan analisis data komputasi.

1. Prinsip Pemilihan Molekul Model

Pemilihan molekul model dalam Praktikum 4 didasarkan pada beberapa prinsip penting.

Pertama, molekul harus **cukup sederhana untuk dihitung**. Praktikum ini ditujukan agar mahasiswa dapat menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris, mengambil energi HOMO dan LUMO, memvisualisasikan orbital, serta menganalisis parameter reaktivitas global. Jika molekul terlalu besar, mahasiswa akan lebih banyak menghadapi masalah teknis daripada memahami konsep.

Kedua, molekul harus **kaya secara konseptual**. Molekul kecil tidak selalu miskin makna. Etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena adalah molekul yang sederhana tetapi sangat penting dalam kimia organik dan kimia kuantum. Melalui molekul-molekul ini, mahasiswa dapat mempelajari ikatan π , orbital π dan π^* , delokalisasi, aromaticitas, karbonil, substituen penarik elektron, donor elektron, akseptor elektron, serta reaktivitas global.

Ketiga, molekul harus **membentuk urutan pembelajaran yang logis**. Etilena menjadi titik awal. Butadiena menunjukkan perluasan sistem π . Benzena menunjukkan delokalisasi siklik aromatik. Formaldehida memperkenalkan gugus fungsi polar. Nitrobenzena memperlihatkan pengaruh substituen terhadap cincin aromatik. Urutan ini membantu mahasiswa membandingkan struktur elektronik secara bertahap.

Keempat, molekul harus **relevan dengan analisis HOMO-LUMO**. Semua molekul model memiliki orbital frontier yang dapat ditafsirkan secara kimia. Etilena dan butadiena cocok untuk membahas gap HOMO-LUMO. Benzena cocok untuk membahas delokalisasi aromatik. Formaldehida cocok untuk membahas LUMO karbonil. Nitrobenzena cocok untuk membahas efek substituen penarik elektron.

Kelima, molekul harus **mendukung analisis Python**. Energi HOMO, LUMO, gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas dapat dihitung dan dibandingkan antarmolekul. Dengan demikian, molekul model juga mendukung literasi data.

2. Ringkasan Peran Molekul Model

Peran kelima molekul model dapat diringkas sebagai berikut:

Molekul	Rumus	Karakter Utama	Fokus Analisis
Etilena	C_2H_4	Ikatan rangkap sederhana	HOMO π dan LUMO π^*
Butadiena	C_4H_6	Sistem π terkonjugasi	Penurunan gap akibat delokalisasi
Benzena	C_6H_6	Sistem aromatik	Delokalisasi π dan stabilitas aromatik
Formaldehida	CH_2O	Gugus karbonil polar	LUMO π^* sebagai akseptor elektron
Nitrobenzena	$C_6H_5NO_2$	Aromatik dengan substituen penarik elektron	Pengaruh gugus nitro terhadap distribusi orbital

Tabel tersebut menunjukkan bahwa setiap molekul membawa fungsi pedagogis tertentu. Mahasiswa tidak hanya menghitung lima senyawa, tetapi membaca lima pola struktur elektronik yang berbeda.

3. Etilena sebagai Sistem π Paling Sederhana

Etilena, atau etena, memiliki rumus molekul C_2H_4 . Molekul ini memiliki satu ikatan rangkap $C=C$. Dalam kimia organik, ikatan rangkap terdiri atas satu ikatan σ dan satu ikatan π . Ikatan π terbentuk dari tumpang tindih orbital p pada dua atom karbon. Karena itulah etilena menjadi model paling sederhana untuk memahami orbital π dan π^* .

Dalam Praktikum 4, etilena digunakan sebagai titik awal untuk memahami HOMO dan LUMO pada sistem π sederhana. HOMO etilena biasanya berkaitan dengan orbital π terisi, sedangkan LUMO berkaitan dengan orbital π^* kosong. Dengan memvisualisasikan HOMO dan LUMO etilena, mahasiswa dapat melihat bagaimana dua atom karbon berkontribusi pada orbital frontier.

Secara konseptual:

Etilena
 → satu ikatan rangkap $C=C$
 → satu orbital π terisi
 → satu orbital π^* kosong
 → model dasar HOMO-LUMO sistem alkena

Etilena penting karena menjadi pembanding bagi butadiena. Jika etilena hanya memiliki satu ikatan π , butadiena memiliki dua ikatan π yang terkonjugasi. Perbandingan ini memungkinkan mahasiswa melihat bagaimana perluasan sistem π memengaruhi gap HOMO-LUMO.

Data yang perlu dicatat untuk etilena:

Data	Keterangan
Energi HOMO	Orbital π terisi tertinggi
Energi LUMO	Orbital π^* kosong terendah
Gap HOMO-LUMO	Acuan sistem π sederhana
Visualisasi HOMO	Distribusi orbital π pada C=C
Visualisasi LUMO	Distribusi orbital π^* pada C=C

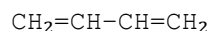
Dalam laporan, mahasiswa dapat menulis analisis seperti berikut:

Pada etilena, HOMO terutama berkaitan dengan orbital π pada ikatan rangkap C=C, sedangkan LUMO berkaitan dengan orbital π^* . Karena sistem π hanya melibatkan dua atom karbon, delokalisasi orbital relatif terbatas. Gap HOMO-LUMO etilena dapat digunakan sebagai pembandingan untuk melihat pengaruh konjugasi pada butadiena.

Analisis tersebut menunjukkan bahwa etilena digunakan bukan hanya sebagai molekul kecil, tetapi sebagai sistem dasar untuk membaca orbital frontier.

4. Butadiena sebagai Sistem π Terkonjugasi

Butadiena memiliki rumus C_4H_6 . Bentuk yang paling relevan dalam praktikum ini adalah 1,3-butadiena, yaitu molekul dengan dua ikatan rangkap yang dipisahkan oleh satu ikatan tunggal:



Butadiena merupakan contoh klasik sistem π terkonjugasi. Pada sistem ini, orbital p pada empat atom karbon dapat saling berinteraksi sehingga elektron π tidak hanya terlokalisasi pada satu ikatan rangkap, tetapi terdelokalisasi sepanjang rantai karbon. Delokalisasi ini mengubah energi orbital molekul.

Dalam teori orbital molekul, semakin banyak orbital p yang berinteraksi, semakin banyak orbital π yang terbentuk. Tingkat energi orbital menjadi lebih rapat. Akibatnya, pemisahan energi antara HOMO dan LUMO dapat lebih kecil dibanding etilena.

Secara konseptual:

Etilena

- 2 atom C berkontribusi pada sistem π
- gap relatif lebih besar

Butadiena

- 4 atom C berkontribusi pada sistem π
- delokalisasi lebih luas
- gap HOMO-LUMO cenderung lebih kecil

Tujuan utama memasukkan butadiena dalam Praktikum 4 adalah agar mahasiswa dapat menjawab pertanyaan diskusi: **mengapa butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena?** Jawaban yang baik harus mengaitkan gap dengan konjugasi dan delokalisasi elektron π .

Data yang perlu dicatat untuk butadiena:

Data	Keterangan
Energi HOMO	Orbital π terisi tertinggi pada sistem terkonjugasi
Energi LUMO	Orbital π^* kosong terendah
Gap HOMO-LUMO	Dibandingkan dengan etilena
Visualisasi HOMO	Penyebaran orbital pada rantai C_4
Visualisasi LUMO	Pola orbital antibonding terdelokalisasi

Contoh analisis:

Butadiena memiliki sistem π yang lebih panjang daripada etilena. Delokalisasi elektron π pada empat atom karbon menyebabkan tingkat energi orbital menjadi lebih rapat. Akibatnya, gap HOMO-LUMO butadiena cenderung lebih kecil dibanding etilena. Hal ini menunjukkan bahwa konjugasi dapat meningkatkan kemampuan molekul untuk mengalami interaksi elektronik atau transisi elektronik tertentu.

Mahasiswa harus berhati-hati agar tidak menyimpulkan secara mutlak bahwa butadiena selalu lebih reaktif dalam semua reaksi. Gap kecil adalah indikator elektronik global, bukan satu-satunya penentu reaktivitas.

5. Benzena sebagai Sistem Aromatik

Benzena memiliki rumus C_6H_6 dan merupakan contoh paling klasik sistem aromatik. Molekul ini memiliki enam atom karbon dalam cincin planar dan enam elektron π yang terdelokalisasi. Dalam kimia organik, benzena dikenal stabil karena aromaticitas. Dalam kimia kuantum, kestabilan ini dapat dipahami melalui delokalisasi orbital π dalam sistem cincin.

Benzena berbeda dari butadiena karena delokalisasinya bersifat siklik dan memenuhi karakter aromatik. Enam elektron π pada benzena tersebar dalam cincin, bukan hanya pada ikatan rangkap tertentu. Representasi struktur Kekulé menggambarkan ikatan rangkap berselang-seling, tetapi struktur elektronik benzena lebih tepat dipahami sebagai sistem π terdelokalisasi.

Dalam Praktikum 4, benzena digunakan untuk memahami:

1. Delokalisasi π pada cincin aromatik.
2. Bentuk HOMO dan LUMO pada sistem aromatik.
3. Stabilitas elektronik akibat aromaticitas.
4. Pembanding untuk nitrobenzena.
5. Pengaruh substituen terhadap cincin aromatik.

Benzena penting karena menjadi referensi sebelum mahasiswa mempelajari nitrobenzena. Dengan menghitung benzena terlebih dahulu, mahasiswa dapat melihat struktur elektronik cincin aromatik tanpa substituen. Setelah itu, nitrobenzena dihitung untuk melihat bagaimana gugus nitro mengubah distribusi elektron.

Data yang perlu dicatat untuk benzena:

Data	Keterangan
Energi HOMO	Orbital terisi tertinggi pada sistem π aromatik
Energi LUMO	Orbital kosong terendah pada sistem π aromatik
Gap HOMO-LUMO	Indikator stabilitas elektronik aromatik
Visualisasi HOMO	Delokalisasi pada cincin benzena
Visualisasi LUMO	Pola orbital kosong pada cincin

Contoh analisis:

Pada benzena, HOMO dan LUMO menunjukkan karakter delokalisasi pada cincin aromatik. Delokalisasi enam elektron π memberikan kestabilan khusus pada sistem benzena. Visualisasi orbital membantu menunjukkan bahwa elektron π tidak terikat pada satu ikatan tertentu, tetapi tersebar dalam sistem cincin.

Dalam analisis kritis, mahasiswa harus memahami bahwa aromaticitas tidak hanya ditentukan oleh gap HOMO-LUMO. Aromaticitas juga berkaitan dengan jumlah elektron π , planaritas, siklisitas, konjugasi penuh, dan kestabilan energi. Gap HOMO-LUMO hanya salah satu indikator elektronik yang dapat mendukung pembahasan.

6. Formaldehida sebagai Model Gugus Karbonil

Formaldehida memiliki rumus CH_2O dan merupakan aldehida paling sederhana. Molekul ini mengandung gugus karbonil $\text{C}=\text{O}$. Gugus karbonil sangat penting dalam kimia organik karena bersifat polar dan sering menjadi pusat reaksi adisi nukleofilik.

Dalam konteks HOMO-LUMO, formaldehida sangat menarik karena LUMO-nya sering berkaitan dengan orbital antibonding π^* pada gugus karbonil. Orbital $\pi^* \text{C}=\text{O}$ dapat menerima elektron dari nukleofil. Karena itu, formaldehida menjadi model sederhana untuk memahami konsep akseptor elektron.

Secara konseptual:

Formaldehida

→ memiliki gugus $\text{C}=\text{O}$

→ ikatan $\text{C}=\text{O}$ polar

→ LUMO π^* karbonil dapat menerima elektron

→ model akseptor elektron dalam reaksi adisi nukleofilik

Formaldehida juga membantu mahasiswa memahami bahwa reaktivitas tidak hanya ditentukan oleh gap global, tetapi juga oleh lokasi orbital. Jika LUMO memiliki kontribusi besar pada atom karbon karbonil, maka hal itu mendukung pemahaman bahwa karbon karbonil dapat menjadi pusat serangan nukleofilik.

Data yang perlu dicatat untuk formaldehida:

Data	Keterangan
Energi HOMO	Orbital terisi tertinggi
Energi LUMO	Orbital π^* karbonil yang berperan sebagai akseptor
Gap HOMO-LUMO	Indikator reaktivitas global
Visualisasi LUMO	Lokasi orbital akseptor pada gugus karbonil
Distribusi orbital	Menunjukkan peran C=O dalam reaktivitas

Contoh analisis:

Pada formaldehida, LUMO berkaitan dengan orbital π^* gugus karbonil. Orbital ini dapat menerima donasi elektron dari nukleofil, sehingga formaldehida dapat dipahami sebagai model sederhana senyawa karbonil yang bersifat elektrofilik pada atom karbon karbonil. Visualisasi LUMO membantu memperjelas lokasi akseptor elektron pada molekul.

Dalam laporan, mahasiswa harus menghindari kesimpulan yang terlalu umum seperti “formaldehida reaktif karena LUMO-nya ada”. Pernyataan yang benar harus mengaitkan LUMO dengan gugus karbonil, orbital π^* , polaritas C=O, dan konteks reaksi adisi nukleofilik.

7. Nitrobenzena sebagai Model Substituen Penarik Elektron

Nitrobenzena memiliki rumus $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$. Molekul ini terdiri atas cincin benzena yang tersubstitusi gugus nitro. Gugus nitro $-\text{NO}_2$ dikenal sebagai substituen penarik elektron kuat. Ia menarik elektron melalui efek induktif dan resonansi. Karena itu, nitrobenzena menjadi molekul model penting untuk melihat pengaruh substituen terhadap struktur elektronik cincin aromatik.

Dalam Praktikum 4, nitrobenzena digunakan untuk menjawab pertanyaan: **bagaimana gugus nitro memengaruhi distribusi elektron?** Pertanyaan ini tidak cukup dijawab dengan menyatakan bahwa nitro adalah gugus penarik elektron. Mahasiswa harus menghubungkannya dengan data HOMO-LUMO dan visualisasi orbital.

Gugus nitro dapat memengaruhi:

1. Energi HOMO.
2. Energi LUMO.
3. Gap HOMO-LUMO.
4. Distribusi orbital pada cincin benzena.
5. Lokalisasi orbital pada gugus nitro.

6. Kecenderungan nitrobenzena sebagai sistem aromatik yang lebih miskin elektron.

Secara konseptual:

Benzena

→ cincin aromatik tanpa substituen

Nitrobenzena

→ cincin aromatik + gugus NO_2

→ gugus NO_2 menarik elektron

→ distribusi orbital berubah

→ reaktivitas cincin berubah

Data yang perlu dicatat untuk nitrobenzena:

Data	Keterangan
Energi HOMO	Dipengaruhi oleh cincin dan substituen
Energi LUMO	Dapat memiliki kontribusi pada gugus nitro
Gap HOMO-LUMO	Dibandingkan dengan benzena
Visualisasi HOMO	Lokasi orbital donor relatif
Visualisasi LUMO	Lokasi orbital akseptor relatif
Parameter elektrofilisitas	Indikator kecenderungan menerima elektron

Contoh analisis:

Pada nitrobenzena, gugus nitro sebagai substituen penarik elektron memengaruhi distribusi orbital pada cincin aromatik. Visualisasi LUMO dapat menunjukkan kontribusi gugus nitro sebagai bagian yang menerima kerapatan elektron. Dibanding benzena, nitrobenzena memperlihatkan perubahan struktur elektronik akibat substitusi, sehingga cocok digunakan untuk memahami hubungan antara substituen dan reaktivitas molekul.

Mahasiswa perlu memahami bahwa nitrobenzena bukan hanya benzena yang “ditambah gugus nitro” secara struktural. Substitusi mengubah struktur elektronik dan reaktivitas cincin. Inilah alasan nitrobenzena penting dalam Praktikum 4.

8. Urutan Pembelajaran Molekul Model

Kelima molekul model dapat disusun sebagai urutan pembelajaran sebagai berikut:

Urutan	Molekul	Konsep yang Ditekankan
1	Etilena	Sistem π sederhana
2	Butadiena	Konjugasi dan penurunan gap
3	Benzena	Aromatisitas dan delokalisasi siklik
4	Formaldehida	LUMO karbonil sebagai akseptor elektron
5	Nitrobenzena	Pengaruh substituen penarik elektron

Urutan tersebut penting karena mahasiswa bergerak dari sistem paling sederhana menuju sistem yang lebih kompleks. Etilena memperkenalkan orbital π dan π^* . Butadiena memperlihatkan bagaimana orbital π menjadi lebih terdelokalisasi. Benzena memperlihatkan delokalisasi aromatik yang lebih khusus. Formaldehida memperkenalkan polaritas gugus fungsi dan LUMO akseptor. Nitrobenzena menggabungkan sistem aromatik dan pengaruh substituen.

Dengan urutan ini, praktikum tidak menjadi kumpulan perhitungan acak. Setiap molekul memiliki fungsi konseptual dalam pembentukan pemahaman mahasiswa.

9. Parameter yang Harus Dicatat untuk Setiap Molekul

Untuk setiap molekul model, mahasiswa harus mencatat data berikut:

1. Nama molekul.
2. Rumus molekul.
3. Software yang digunakan.
4. Metode perhitungan.
5. Fungsional DFT jika digunakan.
6. Basis set.
7. Muatan.
8. Multiplicity.
9. Energi HOMO.
10. Energi LUMO.
11. Gap HOMO-LUMO.
12. Hardness.
13. Softness.
14. Elektronegativitas Mulliken.
15. Indeks elektrofilitas.
16. File visualisasi orbital.
17. Status konvergensi.
18. Catatan interpretasi orbital.

Format tabel awal dapat dibuat sebagai berikut:

Molekul	Metode	Fungsional	Basis Set	HOMO	LUMO	Gap	Catatan Orbital
Etilena	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	...	π dan π^* C=C
Butadiena	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	...	π terkonjugasi
Benzena	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	...	π aromatik
Formaldehida	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	...	π^* karbonil
Nitrobenzena	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	...	pengaruh NO ₂

Data tersebut menjadi dasar untuk subbab 7.6, 7.8, dan 7.9.

10. Muatan dan Multiplicity Molekul Model

Semua molekul model dalam Praktikum 4 umumnya dihitung sebagai molekul netral tertutup pada keadaan dasar. Oleh karena itu, muatan dan multiplicity yang digunakan adalah:

```
muatan = 0
multiplicity = 1
```

Tabel ringkas:

Molekul	Muatan	Multiplicity	Catatan
Etilena	0	1	Singlet tertutup
Butadiena	0	1	Singlet tertutup
Benzena	0	1	Singlet tertutup
Formaldehida	0	1	Singlet tertutup
Nitrobenzena	0	1	Singlet tertutup

Multiplicity 1 berarti keadaan singlet, yaitu semua elektron berpasangan. Jika mahasiswa salah memasukkan multiplicity, energi orbital dan distribusi elektron dapat berubah. Kesalahan muatan atau multiplicity merupakan kesalahan serius karena mengubah sistem yang dihitung.

Dalam laporan, mahasiswa harus menulis muatan dan multiplicity agar perhitungan dapat direproduksi.

11. Struktur Awal Molekul Model

Struktur awal dapat dibuat menggunakan Avogadro, Gabedit, atau editor molekul lain. Mahasiswa dapat menggambar molekul, menambahkan hidrogen, melakukan clean geometry awal, lalu menyimpan dalam format XYZ. Struktur awal bukan hasil akhir; struktur tersebut perlu dioptimasi sebelum energi orbital dianalisis secara lebih layak.

Contoh struktur awal sederhana dalam format konseptual:

Etilena

```
6
etilena struktur awal
C   0.000000   0.000000   0.000000
C   1.340000   0.000000   0.000000
H  -0.540000   0.930000   0.000000
H  -0.540000  -0.930000   0.000000
```

```
H    1.880000    0.930000    0.000000
H    1.880000   -0.930000    0.000000
```

Formaldehida

```
4
formaldehida struktur awal
C    0.000000    0.000000    0.000000
O    1.210000    0.000000    0.000000
H   -0.600000    0.930000    0.000000
H   -0.600000   -0.930000    0.000000
```

Untuk butadiena, benzena, dan nitrobenzena, mahasiswa lebih disarankan membangun struktur dengan Avogadro atau Gabedit agar bentuk awal lebih wajar. Setelah struktur dibuat, mahasiswa perlu memeriksa:

1. Jumlah atom.
2. Simbol atom.
3. Valensi.
4. Keberadaan semua atom H.
5. Geometri awal.
6. Muatan dan multiplicity.
7. Format file.

12. Perbandingan Konseptual Antarmolekul

Perbandingan antarmolekul merupakan inti Praktikum 4. Mahasiswa tidak hanya menganalisis molekul satu per satu, tetapi juga membandingkan pola struktur elektronik.

Perbandingan utama:

Perbandingan	Makna
Etilena vs butadiena	Pengaruh konjugasi terhadap gap
Butadiena vs benzena	Delokalisasi linear vs aromatik
Benzena vs nitrobenzena	Pengaruh substituen penarik elektron
Formaldehida vs etilena	LUMO karbonil vs LUMO alkena
Formaldehida vs nitrobenzena	Perbedaan pusat akseptor elektron

Contoh analisis perbandingan:

Jika gap HOMO-LUMO butadiena lebih kecil daripada etilena, hasil tersebut dapat dikaitkan dengan delokalisasi elektron π yang lebih luas pada butadiena. Jika nitrobenzena memiliki distribusi LUMO yang signifikan pada gugus nitro, hal itu menunjukkan pengaruh gugus nitro sebagai akseptor elektron pada sistem aromatik.

Perbandingan seperti ini melatih mahasiswa menulis analisis berbasis data, bukan hanya deskripsi molekul.

13. Kesalahan Umum dalam Pemilihan dan Analisis Molekul Model

Beberapa kesalahan umum yang perlu dihindari adalah:

Kesalahan	Dampak
Struktur awal salah	Optimasi dan orbital menjadi tidak valid
Atom H kurang	Rumus molekul berubah
Muatan salah	Jumlah elektron berubah
Multiplicity salah	Keadaan spin berubah
Menggunakan geometri belum teroptimasi tanpa catatan	Energi orbital kurang layak dibandingkan
Membandingkan hasil dari metode berbeda	Perbandingan tidak sebanding
Menganggap warna orbital sebagai muatan	Interpretasi visual salah
Menganggap gap sebagai satu-satunya ukuran reaktivitas	Analisis terlalu sederhana
Tidak membandingkan dengan molekul acuan	Makna hasil kurang kuat
Tidak menyimpan file orbital	Visualisasi tidak dapat diverifikasi

Kesalahan-kesalahan ini menunjukkan bahwa pemilihan molekul model harus diikuti dengan disiplin metodologis.

14. Implikasi Pedagogis Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 4 memiliki implikasi pembelajaran yang kuat. Melalui etilena, mahasiswa memahami orbital π paling sederhana. Melalui butadiena, mahasiswa memahami konjugasi dan penurunan gap. Melalui benzena, mahasiswa memahami delokalisasi aromatik. Melalui formaldehida, mahasiswa memahami LUMO karbonil sebagai akseptor elektron. Melalui nitrobenzena, mahasiswa memahami pengaruh substituen penarik elektron pada sistem aromatik.

Secara pedagogis, molekul-molekul ini menghubungkan beberapa cabang kimia:

1. **Kimia kuantum**, melalui orbital dan energi.
2. **Kimia organik**, melalui ikatan π , karbonil, dan substituen.
3. **Kimia fisik**, melalui stabilitas dan transisi elektronik.
4. **Kimia komputasi**, melalui DFT, visualisasi, dan analisis data.
5. **Literasi data**, melalui Python, grafik, dan parameter reaktivitas.

Dengan demikian, molekul model tidak hanya berfungsi sebagai objek hitungan, tetapi sebagai alat pembelajaran lintas konsep.

15. Transisi ke Jalur ChemCompute

Subbab 7.4 telah membahas molekul model Praktikum 4, yaitu etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena. Kelima molekul tersebut dipilih untuk memperlihatkan hubungan antara sistem π sederhana, konjugasi, aromaticitas, gugus karbonil, substituen penarik elektron, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul.

Subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Pada subbab 7.5, mahasiswa akan diarahkan menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris, mengunduh output, mengambil energi HOMO dan LUMO, serta menyiapkan data untuk analisis Python. Molekul model yang telah dibahas pada subbab ini akan menjadi sistem utama dalam workflow tersebut.

7.5 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 4 dirancang sebagai alur praktikum berbasis web yang memungkinkan mahasiswa menjalankan perhitungan **DFT** atau **semiempiris**, mengunduh output, mengambil energi **HOMO**, energi **LUMO**, dan menyiapkan data orbital molekul untuk dianalisis lebih lanjut. Jalur ini penting karena tidak semua mahasiswa memiliki komputer dengan spesifikasi tinggi, tidak semua kelas memiliki akses laboratorium komputasi lokal, dan tidak semua institusi menyediakan lisensi software komersial. Melalui ChemCompute, mahasiswa dapat memasuki praktik kimia komputasi secara lebih mudah tanpa harus terlebih dahulu menguasai instalasi program, konfigurasi sistem operasi, atau manajemen server komputasi.

Namun, kemudahan akses tersebut tidak boleh membuat mahasiswa menganggap ChemCompute sebagai “jalan pintas” tanpa pemahaman. ChemCompute hanyalah **platform** atau **lingkungan akses komputasi**, sedangkan metode kimia kuantum yang digunakan tetap harus disebutkan secara jelas. Jika perhitungan dilakukan melalui ChemCompute dengan GAMESS, maka laporan harus menyebutkan bahwa software komputasi yang bekerja adalah GAMESS, sedangkan ChemCompute berperan sebagai platform web. Jika metode yang dipilih adalah DFT dengan fungsional tertentu dan basis set tertentu, maka semua informasi itu harus dicatat.

Dengan demikian, jalur ChemCompute harus dipahami sebagai workflow ilmiah, bukan sekadar penggunaan situs web. Mahasiswa tetap harus memahami struktur input, jenis perhitungan, pemilihan metode, status output, energi orbital, dan batas interpretasi HOMO-LUMO. Prinsip yang dipakai dalam subbab ini adalah:

ChemCompute memudahkan akses,
tetapi validitas hasil tetap bergantung pada input, metode, basis set,
status perhitungan, dan interpretasi kimia.

1. Pengertian Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute adalah alur kerja praktikum kimia komputasi yang menggunakan ChemCompute sebagai media untuk mengirim, menjalankan, dan mengambil hasil perhitungan struktur elektronik. Dalam konteks Praktikum 4, jalur ini digunakan untuk menghitung sifat elektronik molekul model, terutama energi HOMO, energi LUMO, dan data orbital yang dapat digunakan untuk menafsirkan reaktivitas.

Secara umum, jalur ChemCompute melibatkan tahap-tahap berikut:

```
membangun struktur molekul
→ mengunggah atau memasukkan struktur ke ChemCompute
→ memilih software atau mesin perhitungan
→ memilih metode DFT atau semiempiris
→ menentukan basis set dan parameter
→ menjalankan job
→ mengunduh output
→ mengambil energi HOMO dan LUMO
→ menyiapkan data untuk analisis Python
```

Alur tersebut menunjukkan bahwa ChemCompute berada di tengah proses. Sebelum masuk ChemCompute, mahasiswa harus menyiapkan struktur molekul. Setelah output diperoleh, mahasiswa masih harus membaca output, mengambil data, menghitung gap, dan menafsirkan hasil. Oleh karena itu, ChemCompute bukan akhir praktikum, melainkan salah satu tahap dalam rantai kerja ilmiah.

Dalam Praktikum 4, jalur ChemCompute sangat bermanfaat untuk mahasiswa pemula karena mengurangi hambatan teknis. Mahasiswa tidak perlu menginstal ORCA, GAMESS, Gaussian, atau paket lain secara lokal. Mereka dapat fokus pada pemahaman konsep: apa itu DFT, apa itu HOMO, apa itu LUMO, bagaimana gap dihitung, dan bagaimana data orbital digunakan untuk menafsirkan reaktivitas.

2. Kedudukan ChemCompute dalam Pembelajaran Kimia Komputasi

ChemCompute memiliki kedudukan penting dalam pembelajaran kimia komputasi karena menyediakan akses yang relatif lebih mudah bagi mahasiswa. Dalam sejarah pembelajaran kimia komputasi, salah satu hambatan utama adalah kebutuhan perangkat keras, instalasi software, lisensi, dan kemampuan teknis. Banyak metode kimia kuantum sebenarnya sangat menarik untuk pembelajaran, tetapi sulit diterapkan dalam kelas jika mahasiswa harus menginstal software sendiri.

Platform berbasis web seperti ChemCompute membantu mengatasi sebagian hambatan tersebut. Mahasiswa dapat menjalankan perhitungan melalui browser, mengakses output, dan menggunakan hasilnya untuk analisis. Hal ini sejalan dengan arah pembelajaran sains modern yang menekankan keterampilan digital, literasi data, dan integrasi antara teori dengan simulasi.

Namun, ada satu risiko pedagogis yang harus dikritisi. Karena ChemCompute relatif mudah digunakan, mahasiswa dapat tergoda untuk menjalankan perhitungan tanpa memahami apa yang dilakukan. Mereka mungkin memilih metode secara acak, tidak memperhatikan basis set, tidak memeriksa muatan dan multiplicity, tidak membaca status konvergensi, lalu langsung mengambil angka HOMO-LUMO. Praktik seperti ini tidak mendidik secara ilmiah.

Oleh sebab itu, penggunaan ChemCompute dalam buku ini harus diarahkan pada **pembelajaran berbasis pemahaman**, bukan sekadar pembelajaran berbasis klik. Mahasiswa harus memahami bahwa setiap pilihan dalam ChemCompute memiliki konsekuensi kimia dan komputasi.

3. Persiapan Struktur Molekul Sebelum Masuk ChemCompute

Sebelum menjalankan perhitungan di ChemCompute, mahasiswa harus menyiapkan struktur molekul model. Molekul yang digunakan dalam Praktikum 4 adalah etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena. Struktur dapat dibuat menggunakan Avogadro, Gabedit, atau editor molekul lain.

Tahap persiapan struktur meliputi:

1. Menggambar molekul dengan konektivitas yang benar.
2. Menambahkan seluruh atom hidrogen.
3. Memeriksa valensi setiap atom.
4. Melakukan pembersihan geometri awal.
5. Menyimpan file struktur dalam format yang sesuai.
6. Memastikan molekul netral dan berada pada keadaan singlet.
7. Menyiapkan catatan nama molekul, rumus molekul, muatan, dan multiplicity.

Untuk molekul model dalam Praktikum 4, pengaturan umum yang digunakan adalah:

Molekul	Muatan	Multiplicity	Catatan
Etilena	0	1	Molekul netral tertutup
Butadiena	0	1	Sistem π terkonjugasi
Benzena	0	1	Sistem aromatik
Formaldehida	0	1	Gugus karbonil
Nitrobenzena	0	1	Aromatik dengan gugus nitro

Pengisian muatan dan multiplicity tidak boleh dianggap sebagai formalitas. Muatan menentukan jumlah elektron total dalam sistem. Multiplicity menentukan keadaan spin. Jika mahasiswa salah menulis muatan atau multiplicity, maka sistem yang dihitung bukan lagi molekul yang dimaksud. Kesalahan ini dapat mengubah energi orbital, gap HOMO-LUMO, distribusi elektron, dan interpretasi reaktivitas.

4. Pemilihan Metode pada Jalur ChemCompute

Dalam Praktikum 4, mahasiswa dapat menjalankan perhitungan menggunakan metode **DFT** atau **semiempiris**. Pilihan utama yang dianjurkan adalah DFT, karena fokus praktikum adalah memahami struktur elektronik, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul dengan pendekatan yang lebih representatif dibanding metode sangat sederhana. Namun, metode semiempiris dapat digunakan sebagai alternatif jika waktu komputasi terbatas atau jika perhitungan DFT tidak tersedia.

Perbandingan ringkas:

Metode	Kelebihan	Keterbatasan	Posisi dalam Praktikum
DFT	Lebih baik untuk struktur elektronik dan energi orbital	Bergantung fungsional dan basis set	Pilihan utama
Semiempiris	Cepat dan ringan	Banyak parameter empiris, akurasi terbatas	Alternatif pembelajaran
Hartree–Fock	Teori dasar kuat, tanpa korelasi dinamis lengkap	Gap sering terlalu besar	Telah dibahas pada Bab 6

Jika DFT digunakan, mahasiswa harus mencatat fungsional dan basis set. Misalnya:

```
Metode       : DFT
Fungsional   : B3LYP
Basis set    : 6-31G(d)
Software     : GAMESS melalui ChemCompute
Job          : optimasi geometri atau single point
```

Jika semiempiris digunakan, mahasiswa juga harus menyebutkan metode spesifiknya, misalnya PM3, AM1, atau metode semiempiris lain yang tersedia. Jangan hanya menulis “semiempiris” tanpa rincian.

Dalam konteks Praktikum 4, pilihan metode harus konsisten untuk semua molekul model. Jika etilena dihitung dengan DFT/B3LYP/6-31G(d), maka butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena sebaiknya dihitung dengan metode yang sama. Konsistensi ini penting agar perbandingan HOMO-LUMO dan parameter reaktivitas lebih bermakna.

5. Jenis Job yang Digunakan

Pada jalur ChemCompute, terdapat dua jenis job yang relevan untuk Praktikum 4:

1. **Optimasi geometri**
2. **Single point energy**

Optimasi geometri digunakan untuk mencari struktur molekul yang lebih stabil berdasarkan metode dan basis set tertentu. Dalam optimasi, software memperbarui posisi atom sampai gaya pada atom memenuhi kriteria konvergensi. Setelah struktur teroptimasi diperoleh, energi orbital dapat dianalisis dengan lebih layak.

Single point energy digunakan untuk menghitung energi dan sifat elektronik pada geometri tertentu tanpa mengubah posisi atom. Jika struktur yang digunakan sudah teroptimasi, single point dapat digunakan untuk mengambil energi orbital secara lebih langsung.

Alur ideal dalam Praktikum 4 adalah:

```
struktur awal
→ optimasi geometri
→ struktur teroptimasi
→ perhitungan energi dan orbital
→ pengambilan HOMO-LUMO
```

Namun, dalam pembelajaran dasar, alur dapat disederhanakan jika keterbatasan waktu terjadi. Misalnya, mahasiswa dapat menjalankan optimasi langsung dan mengambil energi orbital dari output optimasi, selama output memberikan informasi orbital yang diperlukan. Jika output tidak memuat orbital yang cukup, mahasiswa perlu menjalankan job lanjutan atau mengatur output agar informasi orbital ditampilkan.

Hal penting yang harus dipahami adalah bahwa nilai HOMO-LUMO dari struktur yang belum dioptimasi dapat berbeda dari nilai pada struktur teroptimasi. Oleh karena itu, laporan harus menyebutkan apakah data orbital diperoleh dari struktur awal, hasil optimasi, atau single point pada geometri teroptimasi.

6. Langkah Umum Menjalankan Perhitungan di ChemCompute

Langkah umum jalur ChemCompute dapat disusun sebagai berikut.

a. Menyiapkan Struktur Molekul

Mahasiswa membuat struktur molekul menggunakan Avogadro atau editor lain. Setelah itu, file disimpan dalam format yang dapat digunakan, misalnya XYZ atau format lain yang kompatibel.

Contoh nama file:

```
etilena_awal.xyz
butadiena_awal.xyz
benzena_awal.xyz
formaldehida_awal.xyz
nitrobenzena_awal.xyz
```

Nama file harus jelas karena Praktikum 4 menggunakan lima molekul. Jika nama file tidak tertib, data mudah tertukar.

b. Masuk ke ChemCompute

Mahasiswa membuka ChemCompute melalui browser, masuk ke menu perhitungan yang sesuai, lalu memilih paket komputasi yang tersedia. Jika menggunakan GAMESS, mahasiswa harus memahami bahwa output yang nanti diunduh adalah output GAMESS, bukan output “ChemCompute” secara metodologis.

c. Memilih Jenis Perhitungan

Mahasiswa memilih jenis job, misalnya optimasi geometri atau perhitungan energi. Jika tersedia pilihan DFT, mahasiswa memilih DFT dan menentukan fungsional. Jika DFT tidak tersedia atau terlalu berat, mahasiswa dapat memilih semiempiris dengan catatan metodologis yang jelas.

d. Menentukan Metode dan Basis Set

Jika menggunakan DFT, mahasiswa menentukan fungsional dan basis set. Untuk pembelajaran dasar, fungsional seperti B3LYP dan basis set seperti 6-31G(d) sering digunakan sebagai contoh karena banyak dikenal dalam pendidikan kimia komputasi. Namun, pilihan ini bukan satu-satunya. Yang terpenting adalah konsistensi dan pelaporan yang lengkap.

e. Memasukkan Muatan dan Multiplicity

Untuk semua molekul model dalam Praktikum 4, pengaturan umum adalah:

```
muatan          : 0
multiplicity    : 1
```

Mahasiswa harus memeriksa bagian ini sebelum menjalankan job.

f. Menjalankan Perhitungan

Setelah semua input diperiksa, mahasiswa menjalankan perhitungan. Selama job berjalan, mahasiswa harus mencatat nama job, molekul, metode, basis set, dan waktu pengiriman jika diperlukan.

g. Mengunduh Output

Setelah perhitungan selesai, output harus diunduh dan disimpan. Output asli tidak boleh dihapus karena menjadi bukti reproduktibilitas.

Contoh nama output:

```
etilena_b3lyp_631gd_output.log
butadiena_b3lyp_631gd_output.log
```

```
benzena_b3lyp_631gd_output.log
formaldehida_b3lyp_631gd_output.log
nitrobenzena_b3lyp_631gd_output.log
```

h. Mengambil Data HOMO dan LUMO

Mahasiswa membaca output untuk menemukan energi orbital. Bagian ini bergantung pada software yang digunakan. Dalam output biasanya terdapat daftar energi orbital atau informasi molecular orbitals. Mahasiswa harus mengidentifikasi orbital terisi tertinggi sebagai HOMO dan orbital kosong terendah sebagai LUMO.

i. Menyimpan Data ke Tabel Awal

Data energi HOMO dan LUMO dimasukkan ke tabel awal, lalu dianalisis lebih lanjut dengan Python pada subbab 7.6.

7. Cara Membaca HOMO dan LUMO dari Output

Membaca HOMO dan LUMO dari output adalah keterampilan penting. Output software kimia komputasi sering panjang dan memuat banyak informasi. Mahasiswa harus belajar membedakan bagian yang relevan dan tidak relevan.

Secara umum, HOMO adalah orbital terisi dengan energi tertinggi. LUMO adalah orbital kosong dengan energi terendah. Dalam output, orbital biasanya diberi informasi okupansi atau daftar energi orbital.

Prinsip identifikasi:

```
orbital terisi terakhir
→ HOMO
```

```
orbital kosong pertama setelah HOMO
→ LUMO
```

Jika output menampilkan orbital berdasarkan okupansi, mahasiswa mencari orbital dengan okupansi terakhir yang masih terisi. Untuk sistem tertutup singlet, orbital terisi biasanya memiliki okupansi 2. Orbital kosong memiliki okupansi 0.

Contoh konseptual:

Nomor Orbital	Okupansi	Energi
14	2	-0.420
15	2	-0.310
16	2	-0.250
17	0	0.040
18	0	0.120

Dalam tabel tersebut:

HOMO = orbital 16
LUMO = orbital 17

Maka:

$E_{\text{HOMO}} = -0.250$
 $E_{\text{LUMO}} = 0.040$
 $\text{Gap} = 0.040 - (-0.250) = 0.290$

Jika satuan energi orbital dalam Hartree, mahasiswa perlu berhati-hati ketika membandingkan atau menyajikan data. Jika akan disajikan dalam eV, konversi harus dilakukan secara konsisten.

8. Konversi Satuan Energi Orbital

Output dapat menyajikan energi orbital dalam Hartree atau eV, bergantung software dan pengaturannya. Untuk analisis Praktikum 4, satuan eV sering lebih mudah dibaca. Jika energi masih dalam Hartree, konversi ke eV dapat dilakukan dengan:

1 Hartree = 27,2114 eV

Rumus konversi:

$\text{Energi\_eV} = \text{Energi\_Hartree} \times 27,2114$

Contoh:

$E_{\text{HOMO}} = -0,250 \text{ Hartree}$
 $E_{\text{LUMO}} = 0,040 \text{ Hartree}$

Maka:

$E_{\text{HOMO}} = -0,250 \times 27,2114 = -6,80285 \text{ eV}$
 $E_{\text{LUMO}} = 0,040 \times 27,2114 = 1,08846 \text{ eV}$
 $\text{Gap} = 1,08846 - (-6,80285)$
 $= 7,89131 \text{ eV}$

Mahasiswa harus memastikan bahwa seluruh data menggunakan satuan yang sama sebelum menghitung gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas. Kesalahan satuan akan menghasilkan interpretasi reaktivitas yang salah.

9. Format Tabel Data Awal dari ChemCompute

Setelah energi HOMO dan LUMO diperoleh, mahasiswa menyusun tabel data awal. Tabel ini akan menjadi input untuk analisis Python pada subbab 7.6.

Format tabel yang dianjurkan:

Molekul	Software	Metode	Fungsional	Basis Set	HOMO	LUMO	Satuan	Status
Etilena	GAMESS/ChemCompute	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	eV	selesai
Butadiena	GAMESS/ChemCompute	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	eV	selesai
Benzena	GAMESS/ChemCompute	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	eV	selesai
Formaldehida	GAMESS/ChemCompute	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	eV	selesai
Nitrobenzena	GAMESS/ChemCompute	DFT	B3LYP	6-31G(d)	...	...	eV	selesai

Tabel tersebut harus disimpan dalam bentuk spreadsheet atau CSV. Data tidak boleh hanya ditulis di buku catatan tanpa file digital, karena subbab berikutnya akan menggunakan Python.

Contoh nama file data awal:

data_homo_lumo_chemcompute.csv

Isi minimal CSV:

```
molekul,software,metode,fungsional,basis_set,homo,lumo,satuan,status
etilena,GAMESS/ChemCompute,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,eV,selesai
butadiena,GAMESS/ChemCompute,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,eV,selesai
benzena,GAMESS/ChemCompute,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,eV,selesai
formaldehida,GAMESS/ChemCompute,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,eV,selesai
nitrobenzena,GAMESS/ChemCompute,DFT,B3LYP,6-31G(d),...,eV,selesai
```

10. Pengambilan Data Orbital Molekul

Selain energi HOMO dan LUMO, Praktikum 4 juga menekankan visualisasi orbital. Oleh karena itu, mahasiswa perlu memahami bahwa data orbital tidak selalu otomatis tersedia dalam file struktur sederhana. File XYZ hanya menyimpan koordinat atom. Untuk menampilkan orbital,

diperlukan output perhitungan yang memuat informasi orbital atau file tambahan seperti cube, molden, atau format visualisasi lain.

Mahasiswa harus membedakan:

File	Isi Utama	Dapat Menampilkan Orbital?
XYZ	Koordinat atom	Tidak, kecuali hanya struktur
LOG/OUT	Output perhitungan	Bisa memuat energi orbital
CHK/FCHK	Data perhitungan Gaussian	Dapat dipakai untuk orbital
CUBE	Data grid orbital/density	Ya
Molden file	Data orbital untuk Molden	Ya
SDF/MOL	Struktur/konektivitas	Tidak memuat orbital frontier secara langsung

Jika ChemCompute menyediakan output yang dapat diunduh, mahasiswa harus menyimpan semua file yang berhubungan dengan job. Jika tersedia file visualisasi orbital, file tersebut harus disimpan dengan nama yang jelas.

Contoh penamaan:

```
benzena_homo.cube
benzena_lumo.cube
nitrobenzena_homo.cube
nitrobenzena_lumo.cube
```

Jika file orbital tidak tersedia, mahasiswa tetap dapat mengambil energi HOMO-LUMO dari output dan melakukan analisis numerik. Namun, laporan harus mencatat bahwa visualisasi orbital tidak dilakukan atau dilakukan dengan alat lain.

11. Contoh Alur untuk Etilena

Etilena digunakan sebagai molekul pertama karena paling sederhana. Alur kerja dapat dibuat sebagai berikut:

1. Buat struktur etilena di Avogadro.
2. Tambahkan seluruh atom H.
3. Bersihkan geometri awal.
4. Simpan sebagai etilena_awal.xyz.
5. Masuk ke ChemCompute.
6. Pilih perhitungan dengan GAMESS.
7. Pilih metode DFT atau semiempiris.
8. Jika DFT, pilih fungsional dan basis set.
9. Masukkan muatan 0 dan multiplicity 1.
10. Jalankan job.
11. Unduh output.
12. Cari energi HOMO dan LUMO.
13. Catat hasil dalam tabel.

Analisis yang diharapkan:

Pada etilena, HOMO berkaitan dengan orbital π C=C dan LUMO berkaitan dengan orbital π^* . Karena sistem π hanya melibatkan dua atom karbon, gap HOMO-LUMO etilena dapat dijadikan pembandingan untuk melihat pengaruh konjugasi pada butadiena.

Etilena menjadi baseline. Artinya, hasil etilena tidak hanya dinilai sendiri, tetapi digunakan sebagai pembandingan bagi molekul lain.

12. Contoh Alur untuk Butadiena

Butadiena digunakan untuk melihat efek konjugasi. Alur teknisnya mirip dengan etilena, tetapi perhatian analisis berbeda.

Tahap praktikum:

1. Buat struktur 1,3-butadiena.
2. Pastikan ikatan rangkap berada pada posisi 1 dan 3.
3. Periksa apakah struktur memungkinkan konjugasi.
4. Simpan sebagai butadiena_awal.xyz.
5. Jalankan perhitungan melalui ChemCompute.
6. Unduh output.
7. Ambil energi HOMO dan LUMO.
8. Bandingkan gap dengan etilena.

Analisis yang diharapkan:

Jika gap butadiena lebih kecil daripada etilena, hasil ini dapat dikaitkan dengan delokalisasi elektron π pada sistem terkonjugasi. Delokalisasi memperluas penyebaran orbital dan menyebabkan tingkat energi orbital menjadi lebih rapat.

Mahasiswa harus menghubungkan angka dengan konsep. Tidak cukup menulis:

Gap butadiena lebih kecil.

Pernyataan harus dilanjutkan dengan alasan kimia:

Gap lebih kecil karena sistem π butadiena lebih terdelokalisasi daripada etilena.

13. Contoh Alur untuk Benzena

Benzena digunakan untuk memahami sistem aromatik. Struktur benzena harus dibuat dengan benar sebagai cincin planar dengan enam atom karbon dan enam atom hidrogen.

Tahap praktikum:

1. Buat struktur benzena.
2. Pastikan semua atom H lengkap.
3. Lakukan pembersihan geometri awal.
4. Simpan sebagai benzena_awal.xyz.
5. Jalankan perhitungan melalui ChemCompute.
6. Ambil energi HOMO dan LUMO.
7. Jika memungkinkan, ambil data orbital untuk visualisasi.
8. Bandingkan dengan nitrobenzena.

Analisis yang diharapkan:

Benzena menunjukkan sistem π aromatik dengan delokalisasi elektron pada cincin. HOMO dan LUMO benzena dapat digunakan sebagai acuan untuk melihat bagaimana substituen nitro mengubah distribusi elektron pada nitrobenzena.

Dalam laporan, benzena sebaiknya tidak hanya dibandingkan dengan butadiena, tetapi terutama dengan nitrobenzena. Perbandingan benzena dan nitrobenzena penting untuk melihat pengaruh substituen.

14. Contoh Alur untuk Formaldehida

Formaldehida digunakan untuk memahami gugus karbonil sebagai akseptor elektron. Struktur formaldehida relatif kecil, tetapi secara konseptual sangat penting.

Tahap praktikum:

1. Buat struktur formaldehida.
2. Pastikan terdapat satu ikatan C=O dan dua ikatan C-H.
3. Simpan sebagai formaldehida_awal.xyz.
4. Jalankan perhitungan melalui ChemCompute.
5. Ambil energi HOMO dan LUMO.
6. Perhatikan kemungkinan karakter LUMO π^* karbonil.
7. Catat hasil dalam tabel.

Analisis yang diharapkan:

Pada formaldehida, LUMO sering berkaitan dengan orbital π^* gugus karbonil. Orbital ini dapat berperan sebagai akseptor elektron dalam interaksi dengan nukleofil. Oleh karena itu, formaldehida digunakan sebagai model sederhana untuk memahami reaktivitas karbonil.

Formaldehida membantu mahasiswa memahami bahwa LUMO bukan sekadar angka energi. Bentuk dan lokasi LUMO menentukan bagaimana molekul dapat berinteraksi dengan donor elektron.

15. Contoh Alur untuk Nitrobenzena

Nitrobenzena merupakan molekul paling kompleks dalam Praktikum 4. Ia menggabungkan cincin aromatik dengan gugus nitro penarik elektron. Karena itu, mahasiswa harus lebih teliti dalam membangun struktur.

Tahap praktikum:

1. Buat struktur benzena.
2. Ganti satu atom H dengan gugus NO_2 .
3. Pastikan konektivitas N-O benar.
4. Periksa semua atom H pada cincin.
5. Simpan sebagai nitrobenzena_awal.xyz.
6. Jalankan perhitungan melalui ChemCompute.
7. Ambil energi HOMO dan LUMO.
8. Bandingkan dengan benzena.
9. Perhatikan pengaruh gugus nitro terhadap distribusi orbital.

Analisis yang diharapkan:

Nitrobenzena memperlihatkan pengaruh substituen penarik elektron terhadap cincin aromatik. Gugus nitro dapat memengaruhi energi HOMO dan LUMO serta mengubah distribusi orbital. Perbandingan dengan benzena membantu menjelaskan bahwa substituen tidak hanya mengubah struktur molekul, tetapi juga mengubah struktur elektronik dan reaktivitas.

Nitrobenzena juga melatih mahasiswa untuk memahami bahwa molekul yang lebih besar dan lebih polar membutuhkan perhatian lebih pada geometri, muatan, dan status konvergensi.

16. Validasi Output

Setelah output diunduh, mahasiswa harus memvalidasi data sebelum memasukkannya ke tabel. Validasi berarti memeriksa apakah output layak digunakan.

Aspek yang harus diperiksa:

Aspek	Pertanyaan Validasi
Job selesai	Apakah perhitungan selesai normal?
Metode benar	Apakah output menunjukkan metode yang dipilih?
Basis set benar	Apakah basis set sesuai?
Muatan benar	Apakah muatan sistem 0?
Multiplicity benar	Apakah multiplicity 1?
Energi orbital tersedia	Apakah HOMO dan LUMO dapat diidentifikasi?
Satuan jelas	Apakah energi dalam Hartree atau eV?
Struktur wajar	Apakah geometri tidak rusak?
Output disimpan	Apakah file output asli tersimpan?

Jika salah satu aspek tidak valid, mahasiswa tidak boleh langsung menggunakan data. Misalnya, jika job gagal konvergen, nilai orbital mungkin tidak layak dianalisis. Jika metode berbeda dari molekul lain, perbandingan menjadi tidak sebanding.

Contoh catatan validasi:

Output butadiena selesai normal.
Metode DFT/B3LYP/6-31G(d) terkonfirmasi.
Muatan 0 dan multiplicity 1.
Energi HOMO dan LUMO ditemukan dalam output.
Data dapat dimasukkan ke tabel analisis.

Catatan validasi seperti ini memperkuat reproduibilitas dan integritas laporan.

17. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum yang sering terjadi adalah:

Kesalahan	Dampak
Tidak menyimpan output asli	Data tidak dapat diverifikasi
Tidak mencatat metode	Hasil tidak dapat dievaluasi
Tidak mencatat basis set	Perbandingan tidak sah
Salah muatan	Jumlah elektron berubah
Salah multiplicity	Keadaan spin berubah
Menyalin energi orbital yang salah	Gap HOMO-LUMO keliru
Mencampur satuan Hartree dan eV	Parameter reaktivitas salah
Menggunakan metode berbeda untuk molekul berbeda	Perbandingan tidak konsisten
Mengira ChemCompute adalah metode	Laporan metodologis tidak tepat
Tidak memeriksa status job	Output gagal dianggap benar

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari karena Praktikum 4 bergantung pada data orbital. Jika data awal salah, maka seluruh analisis Python pada subbab berikutnya juga salah.

18. Format Penyimpanan File

Agar data tertib, mahasiswa harus membuat folder khusus untuk Praktikum 4. Struktur folder yang dianjurkan:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo/
├── struktur_awal/
│   ├── etilena_awal.xyz
│   ├── butadiena_awal.xyz
│   └── benzena_awal.xyz
```

```

├── formaldehida_awal.xyz
├── nitrobenzena_awal.xyz
├── output_chemcompute/
│   ├── etilena_output.log
│   ├── butadiena_output.log
│   ├── benzena_output.log
│   ├── formaldehida_output.log
│   └── nitrobenzena_output.log
├── data/
│   └── data_homo_lumo_chemcompute.csv
├── orbital/
│   ├── etilena_homo.png
│   ├── etilena_lumo.png
│   ├── butadiena_homo.png
│   ├── butadiena_lumo.png
│   └── ...
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_04.docx

```

Struktur folder seperti ini membantu mahasiswa menelusuri data. Jika dosen meminta verifikasi, mahasiswa dapat menunjukkan output asli, tabel data, gambar orbital, dan laporan.

19. Hubungan Jalur ChemCompute dengan Jalur Python

Jalur ChemCompute menghasilkan data. Jalur Python mengolah data. Keduanya tidak boleh dipisahkan secara konseptual. Jika ChemCompute memberikan energi HOMO dan LUMO, Python digunakan untuk menghitung gap dan parameter reaktivitas global.

Hubungan keduanya:

ChemCompute
→ menghasilkan output dan energi orbital

Python
→ membaca data HOMO-LUMO
→ menghitung gap
→ menghitung hardness dan softness
→ menghitung elektronegativitas Mulliken
→ menghitung indeks elektrofilitas
→ membuat grafik
→ menyimpan CSV

Dengan demikian, ChemCompute bukan hanya alat menghasilkan angka. Data dari ChemCompute menjadi bahan baku analisis yang lebih sistematis. Pada subbab 7.6, mahasiswa akan menulis kode Python untuk menghitung parameter reaktivitas dan membuat grafik.

20. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki beberapa implikasi pembelajaran.

Pertama, mahasiswa dapat mempelajari DFT dan HOMO-LUMO tanpa hambatan instalasi software. Hal ini penting untuk kelas besar dan institusi dengan fasilitas terbatas.

Kedua, mahasiswa belajar membedakan platform, software, metode, fungsional, dan basis set. Pemahaman ini penting agar laporan praktikum tidak dangkal.

Ketiga, mahasiswa belajar membaca output kimia komputasi. Output bukan sekadar lampiran, tetapi sumber data yang harus dipahami.

Keempat, mahasiswa belajar menjaga reproduibilitas. Output asli, data CSV, dan catatan metode harus disimpan.

Kelima, mahasiswa belajar bahwa angka HOMO-LUMO harus ditafsirkan dengan hati-hati. Data dari ChemCompute perlu dianalisis, dibandingkan, dan dikaitkan dengan teori reaktivitas.

Dengan demikian, jalur ChemCompute membantu membangun literasi komputasi, literasi data, dan literasi kimia secara bersamaan.

21. Transisi ke Jalur Python Mandiri

Subbab 7.5 telah membahas jalur ChemCompute untuk menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris, mengunduh output, mengambil energi HOMO dan LUMO, serta menyiapkan data orbital molekul. Jalur ini menghasilkan data awal yang sangat penting, tetapi data tersebut belum cukup. Mahasiswa masih harus menghitung gap HOMO-LUMO, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, indeks elektrofilitas, membuat grafik, menyusun diagram tingkat energi orbital, dan menyimpan hasil analisis dalam CSV.

Subbab berikutnya akan membahas jalur Python mandiri. Pada subbab 7.6, mahasiswa akan diarahkan menyusun kode `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` untuk mengolah data HOMO-LUMO menjadi tabel, grafik, diagram energi, dan parameter reaktivitas global. Dengan demikian, jalur ChemCompute dan jalur Python menjadi satu rangkaian kerja yang utuh: ChemCompute menghasilkan data komputasi, sedangkan Python mengubah data tersebut menjadi analisis ilmiah yang terstruktur.

7.6 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri dalam Praktikum 4 merupakan tahap analisis data setelah mahasiswa memperoleh energi **HOMO** dan **LUMO** dari jalur ChemCompute atau software kimia komputasi lain. Jika subbab 7.5 berfokus pada cara memperoleh data dari perhitungan DFT atau semiempiris, maka subbab 7.6 berfokus pada bagaimana data tersebut diolah secara sistematis, reproduibel, dan dapat ditafsirkan secara ilmiah. Dengan demikian, Python tidak digunakan untuk menggantikan perhitungan DFT, melainkan untuk mengubah data mentah HOMO-LUMO menjadi tabel, parameter reaktivitas, grafik perbandingan, dan diagram tingkat energi orbital.

Dalam Praktikum 4, Python digunakan untuk lima tujuan utama:

1. Memasukkan data energi HOMO dan LUMO.
2. Menghitung gap HOMO-LUMO.
3. Menghitung hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas sederhana.
4. Membuat grafik perbandingan gap antar molekul.
5. Membuat visualisasi diagram tingkat energi orbital.

Kelima tujuan tersebut menunjukkan bahwa jalur Python mandiri bukan sekadar tambahan teknis. Jalur ini adalah bagian penting dari metode ilmiah dalam kimia komputasi. Data yang diperoleh dari output software harus diolah, diverifikasi, disusun, dan ditafsirkan. Tanpa analisis data yang tertib, nilai HOMO dan LUMO hanya menjadi angka terpisah yang sulit digunakan untuk membangun argumen kimia.

Python menjadi pilihan yang tepat karena bahasa ini banyak digunakan dalam sains komputasi, analisis data, visualisasi ilmiah, dan otomasi penelitian. Dalam konteks pendidikan kimia, Python membantu mahasiswa memahami bahwa praktikum modern tidak hanya menghasilkan laporan naratif, tetapi juga menghasilkan data terstruktur, kode analisis, grafik, dan file keluaran yang dapat diperiksa ulang. Hal ini sejalan dengan prinsip **reproduibilitas**, yaitu kemampuan orang lain untuk menelusuri kembali proses analisis dari data awal sampai kesimpulan.

1. Kedudukan Python dalam Praktikum 4

Python dalam Praktikum 4 berperan sebagai alat analisis data. Perhitungan DFT, semiempiris, atau struktur elektronik tetap dilakukan oleh software seperti GAMESS, ORCA, Gaussian, atau platform ChemCompute. Python bekerja setelah data energi orbital diperoleh.

Alur umum hubungan ChemCompute dan Python adalah sebagai berikut:

```
ChemCompute / ORCA / GAMESS / Gaussian
→ menghasilkan output perhitungan
→ mahasiswa mengambil energi HOMO dan LUMO
→ data dimasukkan ke tabel awal
→ Python menghitung parameter reaktivitas
```

- Python membuat grafik dan diagram
- hasil digunakan untuk laporan praktikum

Dengan alur tersebut, mahasiswa belajar membedakan tiga jenis kegiatan:

Kegiatan	Alat Utama	Hasil
Perhitungan struktur elektronik	ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian	Energi orbital, output, data molekul
Visualisasi orbital	Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol	Gambar HOMO dan LUMO
Analisis numerik	Python	Gap, hardness, softness, grafik, CSV

Pembedaan ini penting secara metodologis. Python tidak menghitung DFT dalam praktikum ini. Python mengolah data hasil DFT. Jika mahasiswa menulis “Python menghitung HOMO dan LUMO”, pernyataan itu kurang tepat. Pernyataan yang benar adalah:

Energi HOMO dan LUMO diperoleh dari output perhitungan DFT, kemudian dianalisis menggunakan Python untuk menghitung gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas.

Dengan cara ini, laporan praktikum menjadi lebih akurat.

2. Latar Historis Singkat Penggunaan Python dalam Sains Komputasi

Dalam perkembangan sains komputasi modern, Python menjadi bahasa yang sangat penting karena memadukan kemudahan penulisan kode dengan kekuatan pustaka ilmiah. Pustaka seperti **NumPy** memungkinkan perhitungan numerik berbasis array. **Pandas** memudahkan pengelolaan data tabel. **Matplotlib** digunakan untuk membuat grafik ilmiah. Ekosistem ini membuat Python banyak digunakan dalam fisika, kimia, biologi komputasi, pembelajaran mesin, astronomi, teknik, dan analisis data.

Dalam kimia komputasi, Python digunakan untuk berbagai kebutuhan, mulai dari pemrosesan output, pembuatan grafik energi, analisis struktur, pemodelan data, sampai integrasi dengan paket kimia kuantum seperti PySCF. Dalam Praktikum 4, penggunaan Python sengaja dibatasi pada tingkat yang sesuai untuk mahasiswa: membaca atau memasukkan data, menghitung parameter sederhana, membuat grafik, dan menyimpan CSV. Pembatasan ini penting agar tujuan utama praktikum tetap pada pemahaman HOMO-LUMO dan reaktivitas molekul, bukan pada kompleksitas pemrograman.

Secara pedagogis, Python membantu mahasiswa berpindah dari pola kerja manual menuju pola kerja komputasional. Jika perhitungan gap dilakukan satu per satu dengan kalkulator, kesalahan salin dan kesalahan hitung mudah terjadi. Dengan Python, rumus yang sama diterapkan secara konsisten pada semua molekul. Jika data diperbarui, hasil dapat dibuat ulang tanpa menghitung ulang secara manual.

3. Data Masukan Energi HOMO dan LUMO

Data masukan utama dalam jalur Python mandiri adalah energi HOMO dan energi LUMO dari setiap molekul model. Molekul yang digunakan adalah:

1. Etilena
2. Butadiena
3. Benzena
4. Formaldehida
5. Nitrobenzena

Data yang dimasukkan minimal harus memuat:

Kolom	Keterangan
Molekul	Nama molekul
HOMO	Energi HOMO
LUMO	Energi LUMO
Satuan	Hartree atau eV
Metode	Misalnya DFT
Fungsional	Misalnya B3LYP
Basis set	Misalnya 6-31G(d)
Software	Misalnya GAMESS/ChemCompute

Agar analisis berjalan benar, semua energi sebaiknya sudah berada dalam satuan yang sama. Dalam praktikum ini, satuan **eV** dianjurkan karena lebih mudah dibaca untuk energi orbital. Jika output software memberikan energi orbital dalam Hartree, mahasiswa harus mengonversi ke eV dengan faktor:

$$1 \text{ Hartree} = 27,2114 \text{ eV}$$

Rumus konversi:

$$\text{Energi\_eV} = \text{Energi\_Hartree} \times 27,2114$$

Kesalahan satuan adalah salah satu sumber kesalahan paling berbahaya dalam Praktikum 4. Jika sebagian data dalam Hartree dan sebagian dalam eV, maka gap dan parameter reaktivitas menjadi tidak bermakna. Oleh karena itu, sebelum kode Python dijalankan, mahasiswa harus memastikan bahwa seluruh data HOMO dan LUMO menggunakan satuan yang sama.

4. Rumus Dasar Analisis HOMO-LUMO

Rumus pertama yang dihitung adalah **gap HOMO-LUMO**:

$$\text{Gap} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

Karena energi HOMO biasanya bernilai negatif dan energi LUMO dapat bernilai negatif atau positif, mahasiswa harus memperhatikan tanda bilangan. Misalnya:

$$E_{\text{HOMO}} = -6,20 \text{ eV}$$

$$E_{\text{LUMO}} = -1,30 \text{ eV}$$

$$\text{Gap} = -1,30 - (-6,20)$$

$$\text{Gap} = 4,90 \text{ eV}$$

Gap harus bernilai positif karena LUMO berada lebih tinggi energinya daripada HOMO.

Setelah gap dihitung, parameter reaktivitas global sederhana dapat dihitung menggunakan pendekatan berbasis energi orbital frontier. Parameter yang digunakan dalam Praktikum 4 adalah:

$$\text{Hardness } (\eta) = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}) / 2$$

$$\text{Softness } (S) = 1 / \eta$$

$$\text{Elektronegativitas Mulliken } (\chi) = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$$

$$\text{Indeks elektrofilitas } (\omega) = \chi^2 / (2\eta)$$

Makna konseptualnya sebagai berikut:

Parameter	Simbol	Makna
Gap HOMO-LUMO	Gap	Selisih energi orbital frontier
Hardness	η	Resistensi molekul terhadap perubahan distribusi elektron
Softness	S	Kemudahan molekul mengalami perubahan distribusi elektron
Elektronegativitas Mulliken	χ	Kecenderungan molekul menarik elektron secara global
Elektrofilitas	ω	Kecenderungan molekul menerima elektron secara global

Secara teoritis, penggunaan parameter ini berkaitan dengan perkembangan konsep elektronegativitas Mulliken, teori asam-basa keras-lunak Pearson, dan indeks elektrofilitas global yang dikembangkan dalam kerangka DFT konseptual oleh Parr dan rekan-rekannya. Dalam praktikum ini, parameter tersebut digunakan sebagai indikator pembelajaran, bukan sebagai prediksi mutlak seluruh mekanisme reaksi.

5. Batas Interpretasi Parameter Reaktivitas Global

Sebelum kode ditulis, mahasiswa perlu memahami batas interpretasi. Gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas adalah **parameter global**. Artinya, parameter ini menggambarkan kecenderungan molekul secara keseluruhan, bukan lokasi reaksi secara spesifik.

Contoh:

Jika nitrobenzena memiliki indeks elektrofilitas lebih besar daripada benzena, hal itu dapat menunjukkan kecenderungan global yang lebih besar untuk menerima elektron.

Namun, parameter tersebut belum langsung menunjukkan atom mana yang menjadi pusat reaksi.

Untuk mengetahui lokasi reaksi secara lebih spesifik, diperlukan analisis tambahan seperti visualisasi HOMO-LUMO, muatan atomik, fungsi Fukui, peta potensial elektrostatik, atau analisis mekanisme reaksi. Oleh karena itu, dalam Praktikum 4, mahasiswa harus menggabungkan analisis numerik dengan visualisasi orbital.

Pernyataan yang baik dalam laporan adalah:

Nilai gap HOMO-LUMO nitrobenzena lebih kecil daripada benzena dalam data praktikum ini.

Hal tersebut dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro terhadap struktur elektronik cincin aromatik.

Namun, interpretasi reaktivitas tetap perlu dilengkapi dengan visualisasi orbital dan analisis distribusi elektron.

Pernyataan yang terlalu berlebihan adalah:

Nitrobenzena pasti paling reaktif dalam semua reaksi karena gap-nya kecil.

Pernyataan kedua tidak tepat karena mengabaikan konteks reaksi, pelarut, sterik, mekanisme, dan lokasi orbital.

6. Struktur Data dalam Python

Dalam jalur Python mandiri, data dapat dimasukkan langsung ke dalam kode sebagai daftar atau tabel. Untuk pembelajaran awal, cara ini lebih sederhana daripada membaca file eksternal. Namun, untuk praktikum yang lebih rapi, data sebaiknya disimpan dalam file CSV.

Struktur data minimal:

```
molekul,homo_ev,lumo_ev
```

```

etilena,...,...
butadiena,...,...
benzena,...,...
formaldehida,...,...
nitrobenzena,...,...

```

Dalam kode Python, data dapat ditulis sebagai daftar dictionary:

```

data = [
    {"molekul": "Etilena", "homo_ev": -0.0, "lumo_ev": 0.0},
    {"molekul": "Butadiena", "homo_ev": -0.0, "lumo_ev": 0.0},
    {"molekul": "Benzena", "homo_ev": -0.0, "lumo_ev": 0.0},
    {"molekul": "Formaldehida", "homo_ev": -0.0, "lumo_ev": 0.0},
    {"molekul": "Nitrobenzena", "homo_ev": -0.0, "lumo_ev": 0.0},
]

```

Angka -0.0 dan 0.0 dalam contoh tersebut harus diganti dengan data nyata dari output ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software lain. Jika buku ini digunakan sebagai panduan praktikum, bagian tersebut dapat diberi keterangan bahwa data harus diisi berdasarkan output masing-masing mahasiswa.

7. Contoh Data Latihan

Untuk membantu mahasiswa memahami cara kerja kode, dapat digunakan data latihan. Data latihan ini hanya berfungsi sebagai ilustrasi struktur tabel dan alur analisis, bukan sebagai data rujukan final. Mahasiswa wajib mengganti nilai tersebut dengan hasil perhitungan sendiri.

Contoh data latihan:

Molekul	HOMO (eV)	LUMO (eV)
Etilena	-7,60	1,20
Butadiena	-6,20	-0,30
Benzena	-6,80	-0,10
Formaldehida	-7,90	-1,10
Nitrobenzena	-7,20	-2,40

Data latihan tersebut disusun agar mahasiswa dapat melihat pola umum: sistem terkonjugasi dapat memiliki gap lebih kecil daripada sistem π sederhana, dan gugus penarik elektron dapat menurunkan energi LUMO. Namun, angka sebenarnya akan bergantung pada metode, fungsional, basis set, geometri, dan software yang digunakan.

8. Kode Python untuk Analisis HOMO-LUMO

Kode berikut memuat lima unsur wajib Praktikum 4: input energi HOMO-LUMO, perhitungan gap, perhitungan parameter reaktivitas global, grafik perbandingan gap, dan diagram tingkat energi orbital. Nama file resmi untuk kode akan dibahas pada subbab berikutnya, sedangkan subbab ini menekankan isi dan logika kode.

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path

# =====
# PRAKTIKUM 4: DFT, HOMO-LUMO, DAN REAKTIVITAS MOLEKUL
# Jalur Python Mandiri
# =====

# Folder output
output_dir = Path("output_praktikum_04")
output_dir.mkdir(exist_ok=True)

# -----
# 1. Input energi HOMO dan LUMO
# -----
# Catatan:
# - Ganti nilai HOMO dan LUMO di bawah ini dengan data hasil
#   perhitungan ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software lain.
# - Pastikan semua energi menggunakan satuan eV.
# - Data di bawah hanya contoh latihan, bukan data final.

data = [
    {
        "molekul": "Etilena",
        "homo_ev": -7.60,
        "lumo_ev": 1.20,
        "metode": "DFT",
        "fungsional": "B3LYP",
        "basis_set": "6-31G(d)",
    },
    {
        "molekul": "Butadiena",
        "homo_ev": -6.20,
        "lumo_ev": -0.30,
        "metode": "DFT",
        "fungsional": "B3LYP",
        "basis_set": "6-31G(d)",
    },
    {
        "molekul": "Benzena",
        "homo_ev": -6.80,
        "lumo_ev": -0.10,
        "metode": "DFT",
        "fungsional": "B3LYP",
        "basis_set": "6-31G(d)",
    },
    {
        "molekul": "Formaldehida",
        "homo_ev": -7.90,
        "lumo_ev": -1.10,
```

```

        "metode": "DFT",
        "fungsional": "B3LYP",
        "basis_set": "6-31G(d)",
    },
    {
        "molekul": "Nitrobenzena",
        "homo_ev": -7.20,
        "lumo_ev": -2.40,
        "metode": "DFT",
        "fungsional": "B3LYP",
        "basis_set": "6-31G(d)",
    },
]

df = pd.DataFrame(data)

# -----
# 2. Perhitungan gap HOMO-LUMO
# -----

df["gap_ev"] = df["lumo_ev"] - df["homo_ev"]

# -----
# 3. Perhitungan parameter reaktivitas global
# -----
# Rumus:
# hardness eta = gap / 2
# softness S = 1 / eta
# elektronegativitas Mulliken chi = -(HOMO + LUMO) / 2
# indeks elektrofilitas omega = chi^2 / (2 eta)

df["hardness_eta_ev"] = df["gap_ev"] / 2
df["softness_s_ev_inv"] = 1 / df["hardness_eta_ev"]
df["elektronegativitas_chi_ev"] = -(df["homo_ev"] + df["lumo_ev"]) / 2
df["elektrofilitas_omega_ev"] = (
    df["elektronegativitas_chi_ev"] ** 2
) / (2 * df["hardness_eta_ev"])

# -----
# 4. Menyimpan hasil analisis ke CSV
# -----

csv_path = output_dir / "hasil_analisis_homo_lumo.csv"
df.to_csv(csv_path, index=False)

print("Tabel hasil analisis HOMO-LUMO:")
print(df.to_string(index=False))
print(f"\nFile CSV disimpan sebagai: {csv_path}")

# -----
# 5. Grafik perbandingan gap HOMO-LUMO
# -----

plt.figure(figsize=(9, 5))
plt.bar(df["molekul"], df["gap_ev"])
plt.xlabel("Molekul")
plt.ylabel("Gap HOMO-LUMO (eV)")

```

```

plt.title("Perbandingan Gap HOMO-LUMO Antar Molekul")
plt.xticks(rotation=30, ha="right")
plt.tight_layout()

gap_plot_path = output_dir / "grafik_gap_homo_lumo.png"
plt.savefig(gap_plot_path, dpi=300)
plt.show()

print(f"Grafik gap HOMO-LUMO disimpan sebagai: {gap_plot_path}")

# -----
# 6. Diagram tingkat energi orbital
# -----

plt.figure(figsize=(9, 6))

x_positions = range(len(df))

for x, row in zip(x_positions, df.itertuples()):
    # Garis HOMO
    plt.hlines(
        y=row.homo_ev,
        xmin=x - 0.25,
        xmax=x + 0.25,
        linewidth=3,
        label="HOMO" if x == 0 else "",
    )

    # Garis LUMO
    plt.hlines(
        y=row.lumo_ev,
        xmin=x - 0.25,
        xmax=x + 0.25,
        linewidth=3,
        linestyle="dashed",
        label="LUMO" if x == 0 else "",
    )

    # Garis vertikal gap
    plt.vlines(
        x=x,
        ymin=row.homo_ev,
        ymax=row.lumo_ev,
        linestyle="dotted",
        linewidth=1,
    )

plt.xticks(list(x_positions), df["molekul"], rotation=30, ha="right")
plt.ylabel("Energi Orbital (eV)")
plt.title("Diagram Tingkat Energi HOMO dan LUMO")
plt.legend()
plt.tight_layout()

diagram_path = output_dir / "diagram_energi_orbital.png"
plt.savefig(diagram_path, dpi=300)
plt.show()

```

```

print(f"Diagram tingkat energi orbital disimpan sebagai: {diagram_path}")

# -----
# 7. Ringkasan interpretasi otomatis sederhana
# -----

molekul_gap_terkecil = df.loc[df["gap_ev"].idxmin(), "molekul"]
molekul_gap_terbesar = df.loc[df["gap_ev"].idxmax(), "molekul"]

print("\nRingkasan awal:")
print(f"Molekul dengan gap HOMO-LUMO terkecil: {molekul_gap_terkecil}")
print(f"Molekul dengan gap HOMO-LUMO terbesar : {molekul_gap_terbesar}")

print(
    "\nCatatan: Interpretasi reaktivitas tidak boleh hanya berdasarkan gap. "
    "Gunakan juga visualisasi HOMO-LUMO, struktur molekul, efek konjugasi, "
    "gugus fungsi, substituen, dan konteks reaksi."
)

```

Kode tersebut dirancang agar mudah dibaca mahasiswa. Setiap bagian diberi komentar sehingga mahasiswa memahami fungsi setiap baris. Kode tidak hanya menghasilkan tabel, tetapi juga menyimpan CSV dan grafik. Dengan demikian, hasil analisis dapat langsung digunakan dalam laporan.

9. Penjelasan Bagian Kode

Bagian pertama kode mengimpor pustaka:

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path

```

`pandas` digunakan untuk membuat dan mengolah tabel data. `matplotlib.pyplot` digunakan untuk membuat grafik. `Path` digunakan untuk membuat folder output secara lebih rapi.

Bagian berikutnya membuat folder output:

```

output_dir = Path("output_praktikum_04")
output_dir.mkdir(exist_ok=True)

```

Tujuannya agar semua hasil analisis tidak tercecer. File CSV, grafik gap, dan diagram tingkat energi orbital disimpan dalam folder yang sama.

Bagian input data ditulis sebagai daftar dictionary:

```

data = [
    {"molekul": "Etilena", "homo_ev": -7.60, "lumo_ev": 1.20},
    ...
]

```


Struktur ini mudah dibaca karena setiap molekul memiliki pasangan data HOMO dan LUMO. Dalam praktikum sebenarnya, mahasiswa mengganti angka contoh dengan data hasil output.

Bagian perhitungan gap:

```
df["gap_ev"] = df["lumo_ev"] - df["homo_ev"]
```

Baris ini sangat penting. Semua molekul dihitung dengan rumus yang sama. Jika data HOMO dan LUMO benar, gap akan dihitung otomatis.

Bagian parameter reaktivitas:

```
df["hardness_eta_ev"] = df["gap_ev"] / 2
df["softness_s_ev_inv"] = 1 / df["hardness_eta_ev"]
df["elektronegativitas_chi_ev"] = -(df["homo_ev"] + df["lumo_ev"]) / 2
df["elektrofilisitas_omega_ev"] = (
    df["elektronegativitas_chi_ev"] ** 2
) / (2 * df["hardness_eta_ev"])
```

Bagian ini mengubah data orbital menjadi parameter konseptual. Di sinilah Python menjadi alat ilmiah, bukan hanya kalkulator. Rumus yang sama diterapkan pada seluruh molekul sehingga hasil dapat dibandingkan secara konsisten.

10. Output Tabel Analisis

Setelah kode dijalankan, Python menghasilkan tabel analisis. Bentuk tabel yang diharapkan adalah:

Molekul	HOMO	LUMO	Gap	Hardness	Softness	χ	ω
Etilena	...	...	...	...	...	...	...
Butadiena	...	...	...	...	...	...	...
Benzena	...	...	...	...	...	...	...
Formaldehida	...	...	...	...	...	...	...
Nitrobenzena	...	...	...	...	...	...	...

Tabel ini menjadi dasar pembahasan. Mahasiswa harus mampu membaca pola, bukan sekadar menyalin angka. Misalnya, jika butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena, mahasiswa harus mengaitkannya dengan konjugasi. Jika nitrobenzena memiliki LUMO lebih rendah daripada benzena, mahasiswa harus mengaitkannya dengan pengaruh gugus nitro sebagai penarik elektron.

Dalam laporan, tabel tidak boleh berdiri sendiri. Setelah tabel harus ada analisis naratif.

Contoh narasi:

Berdasarkan tabel, butadiena memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada etilena.

Hal ini sesuai dengan konsep delokalisasi elektron π pada sistem terkonjugasi. Delokalisasi menyebabkan tingkat energi orbital frontier menjadi lebih rapat. Dengan demikian, gap butadiena lebih kecil secara kualitatif dapat dikaitkan dengan pengaruh konjugasi.

11. Grafik Perbandingan Gap HOMO-LUMO

Grafik perbandingan gap HOMO-LUMO digunakan untuk melihat pola antarmolekul secara visual. Grafik batang memudahkan mahasiswa membandingkan molekul mana yang memiliki gap besar dan molekul mana yang memiliki gap kecil.

Dalam kode, grafik dibuat dengan:

```
plt.bar(df["molekul"], df["gap_ev"])
```

Sumbu x menunjukkan molekul. Sumbu y menunjukkan gap HOMO-LUMO dalam eV. Grafik disimpan sebagai file gambar resolusi tinggi:

```
plt.savefig(gap_plot_path, dpi=300)
```

Grafik ini berguna untuk pembahasan karena manusia lebih mudah mengenali pola melalui visualisasi. Misalnya, jika butadiena tampak memiliki batang lebih pendek daripada etilena, mahasiswa dapat langsung melihat penurunan gap akibat konjugasi.

Namun, grafik juga harus ditafsirkan hati-hati. Grafik tidak menjelaskan penyebab secara otomatis. Mahasiswa tetap harus menghubungkan pola grafik dengan teori orbital, struktur molekul, delokalisasi, gugus fungsi, dan substituen.

12. Diagram Tingkat Energi Orbital

Diagram tingkat energi orbital menampilkan posisi energi HOMO dan LUMO untuk setiap molekul. Berbeda dari grafik gap yang hanya menunjukkan selisih, diagram orbital memperlihatkan posisi relatif HOMO dan LUMO.

Dalam diagram tersebut:

1. Garis penuh menunjukkan HOMO.
2. Garis putus-putus menunjukkan LUMO.
3. Jarak vertikal antara keduanya menunjukkan gap.
4. Molekul diletakkan pada sumbu horizontal.
5. Energi orbital ditampilkan pada sumbu vertikal.

Diagram seperti ini penting karena dua molekul dapat memiliki gap yang mirip tetapi posisi HOMO dan LUMO berbeda. Misalnya, satu molekul dapat memiliki HOMO rendah dan LUMO juga rendah, sedangkan molekul lain memiliki HOMO tinggi dan LUMO tinggi. Gap keduanya mungkin mirip, tetapi kecenderungan donor dan akseptor elektronnya berbeda.

Dengan demikian, diagram tingkat energi memberikan informasi yang lebih kaya daripada grafik gap saja. Mahasiswa dapat membandingkan:

- Molekul mana yang memiliki HOMO paling tinggi.
- Molekul mana yang memiliki LUMO paling rendah.
- Molekul mana yang gap-nya paling kecil.
- Molekul mana yang cenderung menjadi donor elektron.
- Molekul mana yang cenderung menjadi akseptor elektron.

13. Interpretasi HOMO Tinggi dan LUMO Rendah

Dalam analisis hasil Python, mahasiswa harus memperhatikan dua indikator penting:

1. **HOMO tinggi**
2. **LUMO rendah**

HOMO tinggi sering dikaitkan dengan kecenderungan donor elektron. Jika energi HOMO suatu molekul relatif lebih tinggi dibanding molekul lain, elektron pada orbital terisi tertinggi relatif lebih mudah didonasikan.

LUMO rendah sering dikaitkan dengan kecenderungan akseptor elektron. Jika energi LUMO relatif rendah, molekul tersebut relatif lebih mudah menerima elektron ke orbital kosongnya.

Namun, interpretasi ini harus disampaikan secara hati-hati. Contoh analisis yang baik:

Dalam data praktikum ini, formaldehida memiliki LUMO yang relatif rendah. Hal tersebut dapat dikaitkan dengan keberadaan orbital π^* pada gugus karbonil yang dapat berperan sebagai akseptor elektron. Namun, penentuan pusat reaksi tetap perlu dilengkapi dengan visualisasi LUMO dan analisis struktur karbonil.

Contoh analisis yang kurang tepat:

Formaldehida pasti menerima elektron dalam semua reaksi karena LUMO-nya rendah.

Pernyataan kedua terlalu mutlak dan tidak memperhatikan konteks reaksi.

14. Analisis Hardness dan Softness

Hardness dan softness digunakan untuk membaca kecenderungan molekul terhadap perubahan distribusi elektron. Hardness dihitung sebagai setengah gap HOMO-LUMO. Jika gap besar, hardness juga besar. Jika gap kecil, hardness kecil dan softness besar.

Secara konseptual:

gap besar → hardness besar → molekul relatif sulit dipolarisasi

gap kecil → hardness kecil → softness besar → molekul relatif mudah mengalami perubahan distribusi elektron

Dalam Praktikum 4, mahasiswa dapat membandingkan softness etilena dan butadiena. Jika butadiena memiliki gap lebih kecil, maka hardness-nya lebih kecil dan softness-nya lebih besar. Hal ini dapat dikaitkan dengan sistem π terkonjugasi yang lebih mudah mengalami delokalisasi elektron.

Namun, hardness dan softness tetap parameter global. Parameter ini tidak menunjukkan atom mana yang paling reaktif. Untuk lokasi reaktif, mahasiswa harus melihat visualisasi HOMO-LUMO atau analisis lokal.

15. Analisis Elektronegativitas Mulliken

Elektronegativitas Mulliken dalam praktikum ini dihitung dari energi HOMO dan LUMO:

$$\chi = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$$

Secara konseptual, elektronegativitas Mulliken menggambarkan kecenderungan molekul menarik elektron. Nilai ini berbeda dari elektronegativitas unsur dalam tabel periodik. Elektronegativitas Mulliken pada Praktikum 4 adalah parameter molekuler global yang dihitung dari orbital frontier.

Mahasiswa harus memahami perbedaan berikut:

Jenis Elektronegativitas	Objek	Makna
Elektronegativitas unsur	Atom/unsur	Kecenderungan atom menarik elektron dalam ikatan
Elektronegativitas Mulliken molekul	Molekul	Kecenderungan global molekul menarik elektron berdasarkan energi orbital

Jika nitrobenzena memiliki elektronegativitas Mulliken lebih besar daripada benzena dalam data praktikum, mahasiswa dapat mengaitkannya dengan pengaruh gugus nitro yang menarik elektron. Namun, pernyataan ini harus didukung oleh visualisasi orbital dan struktur molekul.

16. Analisis Indeks Elektrofilitas

Indeks elektrofilitas sederhana dihitung dengan:

$$\omega = \chi^2 / (2\eta)$$

Parameter ini menggambarkan kecenderungan global molekul untuk menerima elektron. Molekul dengan indeks elektrofilitas lebih besar dapat dianggap memiliki kecenderungan elektrofilik global yang lebih kuat. Dalam Praktikum 4, parameter ini berguna untuk membandingkan formaldehida dan nitrobenzena dengan molekul hidrokarbon seperti etilena, butadiena, dan benzena.

Formaldehida mengandung gugus karbonil yang dapat bertindak sebagai pusat akseptor elektron. Nitrobenzena mengandung gugus nitro yang menarik elektron. Oleh karena itu, keduanya dapat menunjukkan karakter elektrofilik tertentu. Namun, indeks elektrofilitas adalah parameter global. Formaldehida dan nitrobenzena memiliki pola reaktivitas berbeda, sehingga perbandingan tidak boleh dibuat secara kasar tanpa konteks.

Contoh analisis yang lebih proporsional:

Nilai indeks elektrofilitas formaldehida menunjukkan kecenderungan global molekul untuk menerima elektron. Secara kimia, hal ini sejalan dengan peran gugus karbonil sebagai pusat akseptor elektron. Akan tetapi, lokasi reaksi harus ditafsirkan melalui visualisasi LUMO dan struktur gugus C=O.

17. Validasi Data Sebelum Analisis Python

Sebelum data dimasukkan ke Python, mahasiswa harus melakukan validasi. Validasi ini penting karena Python akan menghitung apa pun yang dimasukkan. Jika data awal salah, hasil analisis juga salah.

Daftar validasi:

Aspek	Pertanyaan
Molekul	Apakah molekul yang dihitung benar?
Metode	Apakah semua molekul memakai metode yang sama?
Fungsional	Apakah fungsional DFT konsisten?
Basis set	Apakah basis set konsisten?
Satuan	Apakah semua energi dalam eV atau Hartree yang sama?
HOMO	Apakah orbital terisi tertinggi sudah benar?
LUMO	Apakah orbital kosong terendah sudah benar?
Konvergensi	Apakah perhitungan selesai normal?
Geometri	Apakah struktur sudah teroptimasi atau dicatat statusnya?
Output	Apakah file output asli disimpan?

Mahasiswa harus memahami prinsip:

Python tidak memperbaiki data salah.
Python hanya mengolah data yang diberikan.

Karena itu, kualitas hasil Python bergantung pada kualitas data dari output kimia komputasi.

18. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum dalam jalur Python mandiri adalah:

Kesalahan	Dampak
Salah menyalin HOMO atau LUMO	Gap menjadi salah
Mencampur satuan Hartree dan eV	Semua parameter menjadi tidak valid
Lupa tanda negatif pada energi orbital	Gap dan parameter reaktivitas salah
Menggunakan rumus gap terbalik	Gap menjadi negatif
Menganggap softness sebagai satuan eV	Satuan softness seharusnya kebalikan energi
Menganggap Python menghitung DFT	Kesalahan metodologis
Menggunakan data dari metode berbeda	Perbandingan tidak setara
Menafsirkan gap sebagai satu-satunya ukuran reaktivitas	Analisis terlalu dangkal
Tidak menyimpan CSV	Analisis tidak reproduisibel
Tidak menyimpan grafik	Laporan kehilangan bukti visual

Kesalahan ini harus diantisipasi melalui komentar dalam kode, validasi data, dan pembahasan metodologis dalam laporan.

19. Format Laporan Hasil Jalur Python

Hasil jalur Python harus dimasukkan ke laporan praktikum secara sistematis. Struktur pembahasan yang dianjurkan adalah:

1. Menjelaskan sumber data HOMO dan LUMO.
2. Menyebutkan metode, fungsional, basis set, dan software.
3. Menyajikan tabel hasil analisis Python.
4. Menyajikan grafik gap HOMO-LUMO.
5. Menyajikan diagram tingkat energi orbital.
6. Membandingkan etilena dan butadiena.
7. Membandingkan benzena dan nitrobenzena.
8. Membahas formaldehida sebagai model karbonil.
9. Menafsirkan hardness, softness, elektronegativitas, dan elektrofilitas.
10. Menyampaikan keterbatasan analisis.

Contoh paragraf laporan:

Data HOMO dan LUMO diperoleh dari output perhitungan DFT dengan fungsional B3LYP dan basis set 6-31G(d). Data tersebut dianalisis menggunakan Python untuk menghitung gap HOMO-LUMO, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas. Hasil analisis menunjukkan bahwa butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena, yang dapat dikaitkan dengan delokalisasi elektron π pada sistem terkonjugasi. Nitrobenzena menunjukkan perubahan energi orbital dibanding benzena, yang dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron.

Paragraf seperti ini lebih baik daripada sekadar menulis:

Python menghasilkan tabel dan grafik.

Karena laporan ilmiah harus menjelaskan makna data, bukan hanya menyebut hasil teknis.

20. Implikasi Pembelajaran Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki beberapa implikasi penting dalam pembelajaran kimia kuantum.

Pertama, mahasiswa belajar bahwa data kimia komputasi harus diolah secara sistematis. Output software bukan akhir praktikum, tetapi awal analisis.

Kedua, mahasiswa mengembangkan literasi data. Mereka belajar mengubah energi orbital menjadi parameter reaktivitas, grafik, diagram, dan file CSV.

Ketiga, mahasiswa belajar reproduibilitas. Dengan kode Python, analisis dapat dijalankan ulang jika data diperbarui. Hal ini lebih ilmiah daripada perhitungan manual yang tidak terdokumentasi.

Keempat, mahasiswa belajar berpikir kritis. Mereka memahami bahwa gap, hardness, softness, elektronegativitas, dan elektrofilitas adalah indikator global yang perlu ditafsirkan bersama struktur molekul dan visualisasi orbital.

Kelima, mahasiswa belajar menghubungkan kimia dan pemrograman. Python bukan tujuan akhir, tetapi alat untuk memperkuat penalaran kimia.

21. Transisi ke Nama File Kode

Subbab 7.6 telah menjelaskan jalur Python mandiri untuk menganalisis energi HOMO dan LUMO. Kode Python memuat input energi HOMO-LUMO, perhitungan gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, indeks elektrofilitas, grafik perbandingan gap, dan diagram tingkat energi orbital. Dengan demikian, mahasiswa tidak hanya memperoleh angka dari output software, tetapi mampu mengolahnya menjadi data ilmiah yang lebih terstruktur.

Subbab berikutnya akan membahas nama file kode. Penamaan file penting karena berkaitan dengan reproduisibilitas, kerapian folder praktikum, pelacakan versi, dan kemudahan pemeriksaan oleh dosen. Dengan kode yang sudah dipahami pada subbab ini, mahasiswa akan diarahkan memberi nama file secara baku agar seluruh data Praktikum 4 tersimpan tertib.

7.7 Nama File Kode

Nama file kode untuk Praktikum 4 adalah:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Penamaan file tersebut bukan sekadar urusan teknis, melainkan bagian dari disiplin ilmiah dalam praktikum kimia komputasi. Dalam praktikum berbasis data dan kode, nama file berfungsi sebagai identitas, petunjuk isi, penanda urutan, serta alat pelacakan proses kerja. File yang diberi nama secara sembarangan akan menyulitkan mahasiswa, dosen, maupun pembaca laporan ketika harus menelusuri kembali asal data, kode analisis, grafik, tabel, dan kesimpulan. Oleh karena itu, subbab ini menegaskan bahwa file kode Praktikum 4 harus diberi nama baku, jelas, konsisten, dan langsung mencerminkan isi praktikum.

Nama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` memuat empat unsur penting. Pertama, kata `praktikum` menunjukkan bahwa file ini merupakan bagian dari kegiatan praktikum, bukan sekadar contoh kode bebas. Kedua, angka `04` menunjukkan nomor praktikum dalam rangkaian buku, yaitu Praktikum 4. Ketiga, frasa `dft_homo_lumo` menunjukkan fokus isi file, yaitu analisis data DFT, HOMO, LUMO, dan reaktivitas molekul. Keempat, ekstensi `.py` menunjukkan bahwa file tersebut adalah berkas Python.

Dengan demikian, nama file tersebut bersifat informatif. Seseorang yang melihat file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` langsung dapat memahami bahwa file itu berisi kode Python untuk Praktikum 4 tentang DFT dan analisis HOMO-LUMO. Inilah tujuan utama penamaan file dalam kerja ilmiah: mengurangi ambiguitas, memudahkan pelacakan, dan memperkuat reproduisibilitas.

1. Makna Penamaan File dalam Praktikum Kimia Komputasi

Dalam praktikum kimia komputasi, setiap file memiliki fungsi tertentu. Ada file struktur molekul, file input perhitungan, file output software, file gambar orbital, file CSV, file grafik, file kode Python, dan file laporan. Jika semua file diberi nama tanpa pola, proses praktikum akan menjadi kacau. Mahasiswa mungkin tidak tahu lagi file mana yang berisi struktur awal, file mana yang berisi output final, dan file mana yang merupakan kode analisis terakhir.

Nama file kode memiliki kedudukan khusus karena kode adalah instrumen analisis. Pada Praktikum 4, file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` digunakan untuk mengolah data HOMO dan LUMO menjadi gap HOMO-LUMO, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, indeks elektrofilitas, grafik perbandingan gap, diagram tingkat energi orbital, dan file CSV hasil

analisis. Dengan demikian, file kode menjadi penghubung antara data mentah dari output komputasi dan kesimpulan ilmiah dalam laporan.

Penamaan yang baik harus menjawab tiga pertanyaan dasar:

1. **File ini untuk praktikum apa?**
2. **File ini menganalisis topik apa?**
3. **File ini menggunakan bahasa atau format apa?**

Nama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` menjawab ketiganya secara ringkas.

<code>praktikum_04</code>	→ menunjukkan nomor kegiatan praktikum
<code>dft_homo_lumo</code>	→ menunjukkan fokus analisis
<code>.py</code>	→ menunjukkan file Python

Dengan cara ini, nama file membantu membangun keteraturan sejak awal. Keteraturan tersebut sangat penting karena Praktikum 4 melibatkan banyak molekul model, yaitu etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena. Setiap molekul dapat menghasilkan beberapa file output dan gambar orbital. Tanpa sistem penamaan yang jelas, data akan mudah tertukar.

2. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` menggunakan huruf kecil dan garis bawah. Pola ini dianjurkan karena lebih aman, mudah dibaca, dan kompatibel dengan berbagai sistem operasi. Dalam praktik komputasi, penggunaan spasi dalam nama file sering menimbulkan masalah, terutama ketika file dijalankan melalui terminal atau dipanggil oleh program lain.

Bandingkan dua nama file berikut:

`Praktikum 04 DFT HOMO LUMO.py`

dan

`praktikum_04_dft_homo_lumo.py`

Nama pertama memang mudah dibaca manusia, tetapi mengandung spasi. Pada beberapa kondisi, spasi dapat menyulitkan pemanggilan file melalui terminal. Nama kedua lebih stabil karena menggunakan garis bawah sebagai pemisah kata. Pola ini umum dipakai dalam pemrograman dan pengelolaan file ilmiah.

Garis bawah memiliki fungsi sebagai pengganti spasi. Ia menjaga keterbacaan tanpa mengganggu eksekusi kode. Huruf kecil juga membantu menghindari masalah perbedaan kapitalisasi. Pada sebagian sistem operasi, `Praktikum_04.py` dan `praktikum_04.py` dapat dianggap berbeda. Dengan menggunakan huruf kecil secara konsisten, risiko kesalahan dapat dikurangi.

Pola yang dianjurkan:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Pola yang sebaiknya dihindari:

```
Praktikum 04 DFT HOMO LUMO.py
praktikum 04 homo lumo.py
DFT-HOMO-LUMO.py
praktikum04.py
kode_saya.py
final_fix_terbaru_banget.py
```

Nama seperti `kode_saya.py` atau `final_fix_terbaru_banget.py` tidak ilmiah karena tidak menjelaskan isi file secara tepat. Dalam praktikum akademik, file harus mudah dibaca oleh orang lain, bukan hanya oleh pembuatnya.

3. Fungsi Angka 04 dalam Nama File

Angka 04 dalam `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 4. Penulisan angka dengan dua digit, yaitu 04, lebih baik daripada hanya 4 karena menjaga urutan file tetap rapi ketika folder berisi banyak praktikum.

Misalnya, jika file diberi nama:

```
praktikum_1.py
praktikum_2.py
praktikum_10.py
```

urutan file dalam komputer dapat menjadi kurang rapi karena `praktikum_10.py` bisa muncul sebelum `praktikum_2.py` dalam pengurutan alfabetis tertentu. Dengan dua digit, urutannya menjadi lebih tertib:

```
praktikum_01_pengantar.py
praktikum_02_struktur_molekul.py
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Penulisan dua digit mencerminkan kebiasaan baik dalam pengelolaan data. Dalam proyek komputasi yang lebih besar, penomoran seperti ini sangat membantu. Mahasiswa dapat melihat urutan praktikum hanya dari nama file.

Dalam buku ini, angka 04 juga menegaskan kesinambungan dengan praktikum sebelumnya. Praktikum 3 membahas Hartree–Fock dan basis set. Praktikum 4 melanjutkan ke DFT, HOMO–LUMO, dan reaktivitas molekul. Dengan demikian, nama file bukan hanya label teknis, tetapi juga bagian dari struktur pembelajaran.

4. Makna Frasa DFT, HOMO, dan LUMO dalam Nama File

Frasa `dft_homo_lumo` merupakan inti nama file karena menunjukkan substansi analisis. File ini tidak digunakan untuk semua jenis analisis kimia komputasi, tetapi secara khusus untuk Praktikum 4 yang membahas DFT, HOMO, LUMO, gap orbital, dan parameter reaktivitas global.

DFT menunjukkan metode struktur elektronik yang menjadi basis perhitungan. HOMO dan LUMO menunjukkan orbital frontier yang menjadi pusat analisis reaktivitas. Dengan memasukkan istilah tersebut ke dalam nama file, mahasiswa dan dosen dapat langsung mengetahui bahwa file ini berkaitan dengan analisis energi orbital, bukan dengan optimasi geometri biasa atau perhitungan frekuensi vibrasi.

Nama file yang terlalu umum seperti:

```
analisis.py
data.py
hitung.py
praktikum.py
```

tidak dianjurkan karena tidak memberi informasi cukup. Jika folder berisi banyak praktikum, nama seperti itu akan membingungkan. Sebaliknya, nama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` langsung menjelaskan isi dan tujuan file.

Dalam konteks reproduibilitas, nama file yang informatif sangat penting. Ketika laporan praktikum menyebutkan bahwa analisis dilakukan menggunakan file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py`, pembaca dapat menelusuri file tersebut dan mengetahui bahwa kode di dalamnya memang relevan dengan analisis HOMO-LUMO. Hal ini memperkuat keterhubungan antara laporan, data, dan kode.

5. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python

Ekstensi `.py` menunjukkan bahwa file tersebut adalah file Python. Ekstensi ini penting karena memberi tahu sistem operasi dan pengguna bahwa file berisi kode Python yang dapat dijalankan dengan interpreter Python.

Nama lengkap:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

berarti file dapat dijalankan melalui terminal dengan perintah:

```
python praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

atau, pada beberapa sistem:

```
python3 praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Ekstensi `.py` tidak boleh dihapus. Jika file disimpan tanpa ekstensi, komputer dan pengguna lain dapat kesulitan mengenali jenis file. Jika file disimpan dengan ekstensi yang salah, misalnya `.txt`, maka file tidak langsung dikenali sebagai kode Python.

Contoh yang benar:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Contoh yang kurang tepat:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.txt
praktikum_04_dft_homo_lumo.docx
praktikum_04_dft_homo_lumo
praktikum_04_dft_homo_lumo.py.txt
```

Kesalahan terakhir sering terjadi pada sistem operasi yang menyembunyikan ekstensi file. Mahasiswa harus memastikan bahwa file benar-benar berakhiran `.py`, bukan `.py.txt`.

6. Hubungan Nama File dengan Reprodusibilitas

Reprodusibilitas adalah prinsip bahwa proses ilmiah dapat ditelusuri dan diulang. Dalam Praktikum 4, reprodusibilitas berarti orang lain dapat melihat data HOMO-LUMO, menjalankan kode Python, memperoleh tabel dan grafik yang sama, lalu memeriksa apakah kesimpulan dalam laporan sesuai dengan hasil analisis.

Nama file yang baku berperan dalam reprodusibilitas karena memudahkan pelacakan. Jika laporan menyebut:

```
Analisis data dilakukan menggunakan file praktikum_04_dft_homo_lumo.py.
```

maka dosen dapat mencari file tersebut dalam folder praktikum. Jika file ditemukan dan dapat dijalankan, analisis dapat diverifikasi. Jika nama file tidak jelas, proses verifikasi menjadi sulit.

Reprodusibilitas dalam Praktikum 4 melibatkan hubungan berikut:

```
output perhitungan
→ data_homo_lumo_chemcompute.csv
→ praktikum_04_dft_homo_lumo.py
→ hasil_analisis_homo_lumo.csv
→ grafik_gap_homo_lumo.png
→ diagram_energi_orbital.png
→ laporan praktikum
```

Rangkaian tersebut menunjukkan bahwa file Python berada di tengah proses. Ia membaca data, menghitung parameter, membuat grafik, dan menyimpan hasil. Jika file kode tidak dinamai dengan benar, rantai reproduibilitas menjadi lemah.

7. Letak File dalam Struktur Folder Praktikum

File `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` sebaiknya ditempatkan dalam folder utama Praktikum 4 atau dalam subfolder khusus kode. Struktur folder yang dianjurkan adalah:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo/
├── struktur_awal/
│   ├── etilena_awal.xyz
│   ├── butadiena_awal.xyz
│   ├── benzena_awal.xyz
│   ├── formaldehida_awal.xyz
│   └── nitrobenzena_awal.xyz
├── output_chemcompute/
│   ├── etilena_output.log
│   ├── butadiena_output.log
│   ├── benzena_output.log
│   ├── formaldehida_output.log
│   └── nitrobenzena_output.log
├── data/
│   └── data_homo_lumo_chemcompute.csv
├── kode/
│   └── praktikum_04_dft_homo_lumo.py
├── output_praktikum_04/
│   ├── hasil_analisis_homo_lumo.csv
│   ├── grafik_gap_homo_lumo.png
│   └── diagram_energi_orbital.png
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_04.docx
```

Struktur tersebut menunjukkan pemisahan yang rapi antara struktur awal, output komputasi, data, kode, hasil analisis, dan laporan. Pemisahan ini membantu mahasiswa bekerja lebih sistematis. Jika semua file ditempatkan dalam satu folder tanpa pengaturan, folder akan cepat menjadi sulit dibaca.

Dalam praktik sederhana, file kode boleh ditempatkan langsung di folder utama:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo/
└── praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Namun, untuk praktikum yang menghasilkan banyak file, subfolder `kode/` lebih dianjurkan.

8. Hubungan Nama File Kode dengan File Input dan Output

Nama file kode harus konsisten dengan file input dan output. Jika file kode bernama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py`, maka file input dan output sebaiknya juga menggunakan pola yang terkait.

Contoh konsistensi nama file:

Jenis File	Nama yang Dianjurkan
File kode	<code>praktikum_04_dft_homo_lumo.py</code>
Data input CSV	<code>data_homo_lumo_chemcompute.csv</code>
Output analisis CSV	<code>hasil_analisis_homo_lumo.csv</code>
Grafik gap	<code>grafik_gap_homo_lumo.png</code>
Diagram orbital	<code>diagram_energi_orbital.png</code>
Folder output	<code>output_praktikum_04</code>
Laporan	<code>laporan_praktikum_04.docx</code>

Konsistensi ini membuat hubungan antardata lebih jelas. Misalnya, file `data_homo_lumo_chemcompute.csv` merupakan input untuk file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py`. Setelah kode dijalankan, keluar file `hasil_analisis_homo_lumo.csv`, `grafik_gap_homo_lumo.png`, dan `diagram_energi_orbital.png`. Semua file tersebut mendukung laporan `laporan_praktikum_04.docx`.

Hubungan ini dapat ditulis sebagai:

```
data_homo_lumo_chemcompute.csv
→ praktikum_04_dft_homo_lumo.py
→ hasil_analisis_homo_lumo.csv
→ grafik_gap_homo_lumo.png
→ diagram_energi_orbital.png
```

Dengan pola ini, mahasiswa dapat menjelaskan alur data dalam laporan.

9. Versi File dan Revisi Kode

Dalam proses praktikum, mahasiswa mungkin perlu memperbaiki kode. Misalnya, rumus softness salah, data HOMO-LUMO diperbarui, atau grafik perlu diperbaiki. Dalam kondisi seperti ini, mahasiswa harus mengelola versi file secara tertib.

Pola yang dianjurkan:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

sebagai file utama yang digunakan dalam laporan.

Jika perlu menyimpan cadangan revisi, dapat digunakan pola:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo_v01.py
praktikum_04_dft_homo_lumo_v02.py
praktikum_04_dft_homo_lumo_v03.py
```

Namun, pada saat laporan dikumpulkan, harus jelas file mana yang final. File final sebaiknya tetap bernama:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

atau jika sistem kelas meminta versi final:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo_final.py
```

Nama yang sebaiknya dihindari:

```
praktikum_fix.py
praktikum_fix_baru.py
praktikum_fix_banget.py
praktikum_fix_beneran_final.py
praktikum_final_revisi_terakhir_pakai_ini.py
```

Nama seperti itu tidak profesional dan menyulitkan pelacakan. Dalam praktikum ilmiah, revisi harus dikendalikan dengan pola yang jelas, bukan dengan istilah spontan.

10. Komentar Identitas di Awal File Kode

Selain nama file, bagian awal kode juga harus memuat komentar identitas. Komentar ini membantu pembaca memahami isi kode tanpa harus membaca seluruh baris program.

Contoh komentar awal:

```
# =====
# PRAKTIKUM 4: DFT, HOMO-LUMO, DAN REAKTIVITAS MOLEKUL
# Nama file : praktikum_04_dft_homo_lumo.py
# Fungsi   : Menganalisis energi HOMO-LUMO dan parameter
#             reaktivitas global molekul model
# Molekul    : Etilena, butadiena, benzena, formaldehida,
#             nitrobenzena
# =====
```

Komentar tersebut tidak memengaruhi hasil program, tetapi sangat penting untuk dokumentasi. Dalam praktik ilmiah, kode yang baik bukan hanya kode yang berjalan, tetapi kode yang dapat dipahami, diperiksa, dan digunakan kembali.

Mahasiswa dapat menambahkan identitas praktikum:

```
# Nama mahasiswa :
# NIM             :
# Kelas           :
# Tanggal         :
```

Namun, jika kode akan dipakai sebagai template umum dalam buku, identitas pribadi dapat dikosongkan agar mahasiswa mengisinya sendiri.

11. Nama File dan Keterbacaan oleh Dosen

Dalam proses penilaian, dosen sering harus memeriksa banyak file dari banyak mahasiswa. Nama file yang tidak seragam akan memperlambat pemeriksaan. Jika setiap mahasiswa menggunakan nama file berbeda-beda, dosen harus membuka satu per satu untuk mengetahui isinya. Sebaliknya, jika semua mahasiswa menggunakan nama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py`, proses pemeriksaan menjadi lebih efisien.

Penamaan baku juga memudahkan dosen membuat instruksi pengumpulan, misalnya:

Unggah file kode dengan nama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` beserta folder `output_praktikum_04` dan laporan praktikum.

Jika mahasiswa mengganti nama file sesuka hati, file dapat tidak terbaca oleh sistem pengumpulan otomatis. Pada kelas yang menggunakan learning management system atau skrip pengecekan otomatis, nama file yang salah dapat menyebabkan file tidak terdeteksi.

Dengan demikian, nama file bukan hanya urusan pribadi mahasiswa, tetapi bagian dari tata kelola praktikum.

12. Nama File dan Integritas Akademik

Penamaan file juga berhubungan dengan integritas akademik. File yang dinamai dengan jelas memudahkan pelacakan asal data dan proses kerja. Jika mahasiswa mengumpulkan file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py`, dosen dapat memeriksa apakah isi kode sesuai dengan data yang dilaporkan. Jika hasil laporan berbeda dari output kode, ketidaksesuaian dapat ditemukan.

Dalam konteks akademik, kode harus menjadi bukti proses analisis. Mahasiswa tidak boleh hanya menyajikan grafik tanpa menyimpan kode yang menghasilkan grafik tersebut. Grafik yang tidak dapat ditelusuri kembali ke kode dan data memiliki nilai ilmiah yang lebih lemah.

Rantai integritas akademik dalam Praktikum 4 dapat ditulis sebagai:

output software asli
 → data HOMO-LUMO
 → kode Python
 → CSV hasil analisis
 → grafik
 → laporan

Jika salah satu bagian hilang, integritas data melemah. Nama file yang jelas membantu menjaga rantai tersebut.

13. Contoh Isi Minimal File praktikum_04_dft_homo_lumo.py

Meskipun kode lengkap telah dibahas pada subbab 7.6, subbab ini perlu menegaskan bahwa file praktikum_04_dft_homo_lumo.py minimal harus memuat bagian-bagian berikut:

1. Komentar identitas praktikum.
2. Impor pustaka Python.
3. Data energi HOMO dan LUMO.
4. Perhitungan gap HOMO-LUMO.
5. Perhitungan hardness.
6. Perhitungan softness.
7. Perhitungan elektronegativitas Mulliken.
8. Perhitungan indeks elektrofilisitas.
9. Penyimpanan hasil ke CSV.
10. Grafik perbandingan gap.
11. Diagram tingkat energi orbital.
12. Ringkasan hasil.

Kerangka minimal file:

```
# =====
# PRAKTIKUM 4: DFT, HOMO-LUMO, DAN REAKTIVITAS MOLEKUL
# Nama file: praktikum_04_dft_homo_lumo.py
# =====

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# 1. Input data HOMO dan LUMO
# 2. Hitung gap HOMO-LUMO
# 3. Hitung hardness, softness, elektronegativitas, elektrofilisitas
# 4. Simpan hasil CSV
# 5. Buat grafik gap
# 6. Buat diagram tingkat energi orbital
# 7. Tampilkan ringkasan
```

Kerangka ini memberi gambaran bahwa nama file harus sesuai dengan isi. Jangan memberi nama `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` jika file hanya berisi satu baris perintah atau tidak memuat analisis HOMO-LUMO.

14. Kesalahan Umum dalam Penamaan File

Beberapa kesalahan umum dalam penamaan file kode adalah sebagai berikut:

Kesalahan	Contoh	Dampak
Menggunakan spasi	<code>praktikum 04 dft.py</code>	Sulit dipanggil melalui terminal
Tidak memakai nomor praktikum	<code>homo_lumo.py</code>	Urutan praktikum tidak jelas
Terlalu umum	<code>analisis.py</code>	Isi file tidak mudah dikenali
Terlalu panjang	<code>kode_analisis_dft_homo_lumo_semua_molekul_final_terbaru.py</code>	Tidak efisien dan kurang profesional
Tidak memakai ekstensi .py	<code>praktikum_04_dft_homo_lumo</code>	Jenis file tidak jelas
Ekstensi ganda	<code>praktikum_04_dft_homo_lumo.py.txt</code>	File tidak dikenali sebagai Python
Nama tidak sesuai isi	<code>optimasi_geometri.py</code> tetapi berisi HOMO-LUMO	Menyesatkan
Banyak versi tidak jelas	<code>fix1.py</code> , <code>fix2.py</code> , <code>final.py</code>	Revisi sulit dilacak

Kesalahan-kesalahan ini tampak kecil, tetapi dalam praktikum komputasi dapat menyebabkan kebingungan besar. Oleh karena itu, sejak awal mahasiswa harus dilatih menggunakan nama file baku.

15. Standar Pengumpulan File Kode

Untuk keperluan pengumpulan praktikum, standar yang dianjurkan adalah:

Nama file wajib:
`praktikum_04_dft_homo_lumo.py`

File tersebut dikumpulkan bersama:

`hasil_analisis_homo_lumo.csv`
`grafik_gap_homo_lumo.png`
`diagram_energi_orbital.png`
`data_homo_lumo_chemcompute.csv`
`output asli perhitungan`
`laporan praktikum`

Mahasiswa harus memastikan bahwa file Python dapat dijalankan ulang. File yang hanya berjalan di komputer pembuatnya karena jalur folder terlalu spesifik perlu diperbaiki. Hindari menulis lokasi absolut seperti:

`C:/Users/NamaMahasiswa/Desktop/FolderSaya/Data/data.csv`

Lebih baik gunakan jalur relatif:

`data/data_homo_lumo_chemcompute.csv`

atau buat folder output secara otomatis dengan `Path`. Jalur relatif membuat kode lebih mudah dipindahkan ke komputer lain.

16. Implikasi Pedagogis Penamaan File

Penamaan file memiliki implikasi pedagogis yang sering diabaikan. Mahasiswa yang terbiasa memberi nama file secara rapi akan lebih mudah memahami alur kerja ilmiah. Mereka akan melihat bahwa praktikum tidak hanya terdiri atas konsep dan hasil, tetapi juga manajemen data.

Dalam Praktikum 4, penamaan file mengajarkan beberapa keterampilan:

1. **Keterampilan organisasi data**, karena mahasiswa belajar mengelompokkan kode, input, output, dan laporan.
2. **Keterampilan reproduibilitas**, karena file mudah ditelusuri dan dijalankan ulang.
3. **Keterampilan komunikasi ilmiah**, karena nama file menjelaskan isi kepada pembaca.
4. **Keterampilan tanggung jawab akademik**, karena data dan kode dapat diperiksa.
5. **Keterampilan kerja profesional**, karena pola penamaan yang rapi diperlukan dalam riset, industri, dan pendidikan.

Dengan demikian, subbab ini menegaskan bahwa nama file bukan bagian kecil yang boleh diabaikan. Penamaan file adalah bagian dari budaya ilmiah dalam kimia komputasi.

17. Transisi ke Output Kode

Subbab 7.7 telah menetapkan nama file kode resmi untuk Praktikum 4, yaitu `praktikum_04_dft_homo_lumo.py`. Nama ini dipilih karena jelas, informatif, konsisten, mudah dijalankan, dan sesuai dengan isi praktikum. File tersebut menjadi pusat analisis data HOMO-LUMO dan parameter reaktivitas global.

Subbab berikutnya akan membahas output kode. Setelah file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` dijalankan, mahasiswa harus memperoleh tabel HOMO, LUMO, dan gap; diagram energi orbital; grafik gap HOMO-LUMO; tabel parameter reaktivitas global; serta file CSV hasil analisis. Dengan demikian, subbab 7.8 akan menjelaskan bagaimana hasil dari kode tersebut harus dibaca, disimpan, dan digunakan dalam laporan praktikum.

7.8 Output Kode

Output kode dalam Praktikum 4 merupakan hasil yang diperoleh setelah file `praktikum_04_dft_homo_lumo.py` dijalankan. Jika subbab 7.6 membahas logika dan isi kode, serta subbab 7.7 menetapkan nama file kode, maka subbab 7.8 menjelaskan bentuk keluaran yang harus dihasilkan, disimpan, dibaca, dan digunakan dalam laporan praktikum. Output kode bukan sekadar hasil teknis dari program Python, tetapi merupakan bukti bahwa data HOMO-LUMO telah diolah secara sistematis menjadi informasi kimia yang dapat ditafsirkan.

Dalam Praktikum 4, output kode wajib memuat lima komponen utama:

1. **Tabel HOMO, LUMO, dan gap.**
2. **Diagram energi orbital.**
3. **Grafik gap HOMO-LUMO.**
4. **Tabel parameter reaktivitas global.**
5. **File CSV hasil analisis.**

Kelima output tersebut saling melengkapi. Tabel HOMO, LUMO, dan gap menyajikan data dasar. Diagram energi orbital memperlihatkan posisi relatif HOMO dan LUMO. Grafik gap HOMO-LUMO membantu membandingkan stabilitas dan reaktivitas elektronik antarmolekul. Tabel parameter reaktivitas global mengembangkan data orbital menjadi indikator kimia seperti hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas. File CSV memastikan bahwa hasil analisis dapat disimpan, dibuka kembali, diperiksa, dan digunakan ulang.

Dengan demikian, output kode harus dipahami sebagai bagian dari **rantai reproduibilitas ilmiah**. Data dari output perhitungan DFT atau semiempiris diolah dengan Python. Python menghasilkan tabel, grafik, diagram, dan CSV. Hasil tersebut kemudian menjadi dasar

pembahasan dalam laporan praktikum. Jika output kode tidak disimpan dengan baik, maka kesimpulan dalam laporan akan sulit diverifikasi.

1. Kedudukan Output Kode dalam Workflow Praktikum

Dalam workflow Praktikum 4, output kode berada setelah tahap pengambilan data HOMO-LUMO dari software kimia komputasi. Data awal dapat berasal dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software lain. Setelah data dimasukkan ke Python, kode menghasilkan output analisis.

Alur lengkapnya dapat ditulis sebagai berikut:

```
struktur molekul
→ perhitungan DFT atau semiempiris
→ output software kimia komputasi
→ data HOMO dan LUMO
→ kode praktikum_04_dft_homo_lumo.py
→ tabel, grafik, diagram, CSV
→ analisis laporan praktikum
```

Output kode memiliki fungsi penting karena menjadi penghubung antara data komputasi dan interpretasi kimia. Nilai HOMO dan LUMO yang diambil dari output software masih berupa data mentah. Setelah diproses Python, data tersebut berubah menjadi informasi yang lebih mudah dibandingkan, divisualisasikan, dan ditafsirkan.

Dalam konteks pembelajaran, output kode membantu mahasiswa memahami bahwa praktikum kimia kuantum tidak berhenti pada proses menjalankan software. Software menghasilkan data, tetapi mahasiswa harus mengolah data tersebut menjadi argumen ilmiah. Di sinilah Python memainkan peran penting: mengubah data numerik menjadi tabel, grafik, dan parameter reaktivitas yang dapat dibaca secara konseptual.

2. Output Pertama: Tabel HOMO, LUMO, dan Gap

Output pertama yang harus dihasilkan adalah **tabel HOMO, LUMO, dan gap**. Tabel ini memuat energi HOMO, energi LUMO, dan selisih energi antara keduanya. Tabel ini merupakan fondasi seluruh analisis dalam Praktikum 4 karena semua parameter berikutnya dihitung dari energi HOMO dan LUMO.

Format tabel yang dianjurkan adalah:

No.	Molekul	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Gap HOMO-LUMO (eV)
1	Etilena	...	...	...
2	Butadiena	...	...	...

3	Benzena	...	...	...
4	Formaldehida	...	...	...
5	Nitrobenzena	...	...	...

Rumus gap yang digunakan adalah:

$$\text{Gap HOMO-LUMO} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

Tabel ini harus disusun dengan satuan yang konsisten. Jika HOMO dan LUMO ditulis dalam eV, maka gap juga harus dalam eV. Jika energi orbital masih dalam Hartree, mahasiswa harus mengonversinya terlebih dahulu atau menyatakan dengan jelas bahwa satuan yang digunakan adalah Hartree. Untuk laporan praktikum, satuan eV lebih dianjurkan karena lebih mudah dibaca dalam konteks energi orbital.

Tabel HOMO, LUMO, dan gap memungkinkan mahasiswa membandingkan molekul model secara langsung. Misalnya, etilena dapat dibandingkan dengan butadiena untuk melihat pengaruh konjugasi. Benzena dapat dibandingkan dengan nitrobenzena untuk melihat pengaruh substituen penarik elektron. Formaldehida dapat dianalisis sebagai model gugus karbonil dengan LUMO yang relevan sebagai akseptor elektron.

Namun, tabel ini tidak boleh dibaca secara mekanis. Mahasiswa tidak cukup menyatakan bahwa satu molekul memiliki gap lebih kecil daripada molekul lain. Mereka harus menjelaskan maknanya. Jika butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena, penjelasannya harus dikaitkan dengan delokalisasi elektron π . Jika nitrobenzena memiliki LUMO lebih rendah daripada benzena, penjelasannya harus dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron.

Contoh narasi yang baik:

Berdasarkan tabel HOMO, LUMO, dan gap, butadiena menunjukkan gap HOMO-LUMO yang lebih kecil daripada etilena. Hal ini dapat dikaitkan dengan sistem π terkonjugasi pada butadiena yang menyebabkan delokalisasi elektron lebih luas. Delokalisasi tersebut memperkecil pemisahan energi antara orbital terisi tertinggi dan orbital kosong terendah.

Contoh narasi yang kurang tepat:

Butadiena lebih reaktif karena gap-nya kecil.

Pernyataan kedua terlalu singkat dan terlalu mutlak. Analisis ilmiah harus menyebutkan konteks, alasan kimia, dan batas interpretasi.

3. Validasi Tabel HOMO, LUMO, dan Gap

Sebelum tabel digunakan dalam laporan, mahasiswa harus memvalidasi data. Validasi tabel bertujuan memastikan bahwa angka yang dihitung Python memang berasal dari data yang benar.

Aspek validasi meliputi:

Aspek	Pertanyaan Validasi
Molekul	Apakah nama molekul sesuai dengan output perhitungan?
HOMO	Apakah energi HOMO diambil dari orbital terisi tertinggi?
LUMO	Apakah energi LUMO diambil dari orbital kosong terendah?
Satuan	Apakah semua energi dalam satuan yang sama?
Gap	Apakah rumus $LUMO - HOMO$ digunakan dengan benar?
Tanda negatif	Apakah tanda negatif pada energi orbital tidak hilang?
Metode	Apakah semua molekul dihitung dengan metode yang sebanding?
Status output	Apakah output perhitungan selesai normal?

Validasi penting karena Python tidak mengetahui apakah data yang dimasukkan benar secara kimia. Jika mahasiswa salah menyalin nilai HOMO atau LUMO, Python tetap akan menghitung gap. Hasilnya tampak rapi, tetapi secara ilmiah salah. Prinsip yang perlu ditekankan adalah:

Output Python yang rapi tidak menjamin data benar.
Data benar hanya dapat dipastikan melalui validasi output perhitungan.

Oleh karena itu, tabel HOMO, LUMO, dan gap harus selalu ditelusuri kembali ke output asli software komputasi.

4. Output Kedua: Diagram Energi Orbital

Output kedua adalah **diagram energi orbital**. Diagram ini menampilkan posisi energi HOMO dan LUMO untuk setiap molekul. Jika tabel menyajikan angka, diagram energi orbital menyajikan hubungan visual antartingkat energi. Diagram ini membantu mahasiswa memahami bukan hanya besar gap, tetapi juga posisi relatif HOMO dan LUMO.

Dalam diagram energi orbital, sumbu vertikal menunjukkan energi orbital, biasanya dalam eV. Setiap molekul diletakkan pada sumbu horizontal. HOMO ditampilkan sebagai garis energi terisi, sedangkan LUMO ditampilkan sebagai garis energi kosong. Jarak vertikal antara HOMO dan LUMO menunjukkan gap.

Secara konseptual:

garis HOMO
→ tingkat energi orbital terisi tertinggi

garis LUMO
→ tingkat energi orbital kosong terendah

jarak HOMO ke LUMO
→ gap HOMO-LUMO

Diagram energi orbital penting karena dua molekul dapat memiliki gap yang mirip tetapi posisi HOMO dan LUMO berbeda. Misalnya, satu molekul dapat memiliki HOMO yang relatif tinggi dan LUMO yang juga relatif tinggi. Molekul lain dapat memiliki HOMO rendah dan LUMO rendah. Gap keduanya mungkin mirip, tetapi kecenderungan donor dan akseptor elektronnya berbeda.

Dengan diagram orbital, mahasiswa dapat membaca beberapa hal:

1. Molekul mana yang memiliki HOMO paling tinggi.
2. Molekul mana yang memiliki LUMO paling rendah.
3. Molekul mana yang memiliki gap paling kecil.
4. Molekul mana yang secara global cenderung lebih mudah menjadi donor elektron.
5. Molekul mana yang secara global cenderung lebih mudah menjadi akseptor elektron.
6. Bagaimana posisi orbital berubah akibat konjugasi atau substituen.

Contoh interpretasi:

Jika diagram energi orbital menunjukkan bahwa LUMO nitrobenzena lebih rendah daripada LUMO benzena, hal ini dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron. Gugus nitro dapat menstabilkan orbital kosong tertentu sehingga nitrobenzena memiliki kecenderungan akseptor elektron yang berbeda dari benzena.

Diagram energi orbital harus diberi judul, label sumbu, satuan energi, dan keterangan HOMO-LUMO. Diagram yang tidak memiliki label tidak layak digunakan sebagai bukti ilmiah karena pembaca tidak dapat memahami apa yang sedang dibandingkan.

5. Kriteria Diagram Energi Orbital yang Baik

Diagram energi orbital yang baik harus memenuhi beberapa kriteria.

Pertama, **sumbu energi harus jelas**. Jika energi dinyatakan dalam eV, maka sumbu y harus diberi label Energi Orbital (eV). Jangan menampilkan angka tanpa satuan.

Kedua, **molekul harus diberi label**. Setiap posisi pada sumbu x harus menunjukkan nama molekul: etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena.

Ketiga, **HOMO dan LUMO harus dibedakan**. Perbedaan dapat ditampilkan dengan jenis garis berbeda, misalnya garis penuh untuk HOMO dan garis putus-putus untuk LUMO. Dalam naskah buku, dapat dijelaskan bahwa perbedaan garis bertujuan memudahkan pembaca, bukan menunjukkan sifat fisik tertentu.

Keempat, **diagram tidak boleh terlalu ramai**. Praktikum ini hanya menggunakan lima molekul, sehingga diagram masih mudah dibaca. Jika jumlah molekul terlalu banyak, diagram perlu diatur ulang agar tidak membingungkan.

Kelima, **diagram harus konsisten dengan tabel**. Nilai energi pada diagram harus berasal dari tabel yang sama. Jangan sampai diagram menunjukkan gap berbeda dari tabel karena data yang digunakan tidak sama.

Keenam, **diagram harus disimpan sebagai file gambar**. File gambar yang dianjurkan adalah PNG dengan resolusi cukup tinggi, misalnya 300 dpi. Nama file yang dianjurkan:

`diagram_energi_orbital.png`

File ini kemudian dimasukkan ke laporan praktikum.

6. Output Ketiga: Grafik Gap HOMO-LUMO

Output ketiga adalah **grafik gap HOMO-LUMO**. Grafik ini biasanya berbentuk grafik batang yang membandingkan besar gap setiap molekul. Berbeda dari diagram energi orbital yang menampilkan posisi HOMO dan LUMO, grafik gap langsung menampilkan selisih energi antara LUMO dan HOMO.

Format grafik yang dianjurkan:

- Sumbu x: nama molekul.
- Sumbu y: gap HOMO-LUMO dalam eV.
- Judul: Perbandingan Gap HOMO-LUMO Antar Molekul.
- Setiap batang mewakili satu molekul.
- Grafik disimpan sebagai `grafik_gap_homo_lumo.png`.

Grafik gap sangat berguna untuk membandingkan stabilitas elektronik relatif. Dalam pembelajaran awal, gap besar sering dikaitkan dengan stabilitas elektronik yang lebih tinggi dan reaktivitas elektronik yang lebih rendah. Gap kecil sering dikaitkan dengan kemudahan eksitasi atau interaksi donor-akseptor yang lebih besar. Namun, interpretasi ini harus selalu dibatasi.

Contoh interpretasi grafik:

Grafik gap HOMO-LUMO menunjukkan bahwa butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena. Pola ini mendukung pemahaman bahwa konjugasi pada butadiena menyebabkan delokalisasi elektron π yang lebih luas dan memperkecil pemisahan energi orbital frontier.

Contoh interpretasi yang harus dihindari:

Molekul dengan batang paling kecil pasti paling reaktif dalam semua reaksi.

Pernyataan tersebut terlalu absolut. Grafik gap adalah indikator global, bukan penentu tunggal reaktivitas. Mahasiswa harus menghubungkan grafik dengan visualisasi orbital, struktur molekul, substituen, dan konteks reaksi.

7. Hubungan Grafik Gap dengan Konjugasi dan Substituen

Grafik gap HOMO-LUMO digunakan untuk melihat pengaruh struktur terhadap energi orbital. Dalam Praktikum 4, dua hubungan penting yang harus diperhatikan adalah hubungan gap dengan konjugasi dan hubungan gap dengan substituen.

Perbandingan pertama adalah **etilena dan butadiena**. Etilena memiliki satu ikatan rangkap, sedangkan butadiena memiliki dua ikatan rangkap terkonjugasi. Jika data praktikum menunjukkan gap butadiena lebih kecil daripada etilena, maka mahasiswa dapat mengaitkannya dengan delokalisasi π yang lebih luas pada butadiena.

Secara ringkas:

etilena
→ sistem π pendek
→ gap relatif lebih besar

butadiena
→ sistem π terkonjugasi
→ delokalisasi lebih luas
→ gap relatif lebih kecil

Perbandingan kedua adalah **benzena dan nitrobenzena**. Benzena merupakan sistem aromatik tanpa substituen, sedangkan nitrobenzena memiliki gugus nitro sebagai substituen penarik elektron. Jika nitrobenzena menunjukkan LUMO yang lebih rendah atau gap yang berubah secara signifikan, maka mahasiswa dapat membahas pengaruh gugus nitro terhadap struktur elektronik cincin aromatik.

Secara ringkas:

benzena
→ sistem aromatik netral tanpa substituen

nitrobenzena
→ sistem aromatik dengan gugus NO_2
→ distribusi elektron berubah
→ energi orbital frontier berubah

Grafik gap tidak dapat menjelaskan seluruh detail tersebut sendirian. Grafik hanya menunjukkan pola numerik. Penjelasan kimia harus datang dari teori dan visualisasi orbital.

8. Output Keempat: Tabel Parameter Reaktivitas Global

Output keempat adalah **tabel parameter reaktivitas global**. Tabel ini merupakan pengembangan dari tabel HOMO-LUMO. Data HOMO dan LUMO digunakan untuk menghitung beberapa parameter, yaitu:

1. Gap HOMO-LUMO.
2. Hardness.
3. Softness.
4. Elektronegativitas Mulliken.
5. Indeks elektrofilisitas sederhana.

Format tabel yang dianjurkan:

Molekul	Gap (eV)	Hardness η (eV)	Softness S (eV ⁻¹)	χ Mulliken (eV)	ω Elektrofilisitas (eV)
Etilena	...	...	...	...	...
Butadiena	...	...	...	...	...
Benzena	...	...	...	...	...
Formaldehida	...	...	...	...	...
Nitrobenzena	...	...	...	...	...

Rumus yang digunakan:

$$\text{Gap} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\eta = \text{Gap} / 2$$

$$S = 1 / \eta$$

$$\chi = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$$

$$\omega = \chi^2 / (2\eta)$$

Tabel parameter reaktivitas global membantu mahasiswa membaca data secara lebih konseptual. Gap menunjukkan selisih energi orbital frontier. Hardness menunjukkan resistensi molekul terhadap perubahan distribusi elektron. Softness menunjukkan kemudahan perubahan distribusi elektron. Elektronegativitas Mulliken menunjukkan kecenderungan menarik elektron secara global. Indeks elektrofilisitas menunjukkan kecenderungan menerima elektron secara global.

Namun, semua parameter ini tetap bersifat global. Artinya, parameter tersebut menggambarkan kecenderungan molekul secara keseluruhan, bukan lokasi atom tertentu yang bereaksi. Untuk lokasi reaktivitas, mahasiswa perlu melihat visualisasi HOMO-LUMO atau analisis lokal lain.

9. Interpretasi Tabel Parameter Reaktivitas Global

Tabel parameter reaktivitas global harus dibaca dengan hati-hati. Setiap parameter memiliki makna, tetapi tidak boleh ditafsirkan secara terpisah dari struktur molekul.

Hardness berkaitan dengan besar gap. Jika gap besar, hardness besar. Molekul dengan hardness besar cenderung lebih sulit mengalami perubahan distribusi elektron. Sebaliknya, molekul dengan hardness kecil cenderung lebih mudah mengalami perubahan distribusi elektron.

Softness adalah kebalikan dari hardness. Jika hardness kecil, softness besar. Molekul dengan softness besar sering dianggap lebih mudah dipolarisasi atau lebih mudah mengalami perubahan distribusi elektron.

Elektronegativitas Mulliken menunjukkan kecenderungan menarik elektron secara global. Dalam konteks molekul seperti nitrobenzena, nilai elektronegativitas Mulliken dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro, tetapi tetap harus dibahas secara hati-hati.

Indeks elektrofilisitas menunjukkan kecenderungan global molekul menerima elektron. Formaldehida dan nitrobenzena dapat menjadi contoh penting karena keduanya memiliki pusat atau gugus yang dapat dikaitkan dengan sifat akseptor elektron.

Contoh narasi analisis:

Tabel parameter reaktivitas global menunjukkan bahwa molekul dengan gap lebih kecil memiliki hardness lebih rendah dan softness lebih tinggi. Dalam data praktikum ini, pola tersebut dapat digunakan untuk membandingkan sistem π sederhana dan sistem π terkonjugasi. Butadiena, sebagai sistem terkonjugasi, dapat menunjukkan softness lebih besar daripada etilena karena delokalisasi elektron π memperkecil gap HOMO-LUMO.

Contoh lain:

Jika indeks elektrofilisitas formaldehida relatif tinggi, hasil tersebut dapat dikaitkan dengan keberadaan gugus karbonil yang memiliki orbital π^* sebagai akseptor elektron. Namun, penentuan pusat reaksi tetap perlu didukung oleh visualisasi LUMO formaldehida.

Analisis semacam ini menunjukkan hubungan antara angka, teori, dan struktur molekul.

10. Output Kelima: File CSV Hasil Analisis

Output kelima adalah **file CSV hasil analisis**. File CSV sangat penting karena menyimpan data hasil Python dalam format tabel yang dapat dibuka kembali dengan spreadsheet, editor teks, atau program analisis lain. File CSV juga menjadi bukti reproduibilitas karena menyimpan hasil yang digunakan untuk membuat tabel dan grafik dalam laporan.

Nama file CSV yang dianjurkan:

hasil_analisis_homo_lumo.csv

Isi file CSV minimal mencakup:

molekul,homo_ev,lumo_ev,gap_ev,hardness_eta_ev,softness_s_ev_inv,elektronegativitas_chi_ev,elektrofilisitas_omega_ev

Contoh struktur isi:

molekul	homo_ev	lumo_ev	gap_ev	hardness_eta_ev	softness_s_ev_inv	elektronegativitas_chi_ev	elektrofilisitas_omega_ev
Etilena	...	...	...	...	...	...	...
Butadiena	...	...	...	...	...	...	...
Benzena	...	...	...	...	...	...	...
Formaldehida	...	...	...	...	...	...	...
Nitrobenzena	...	...	...	...	...	...	...

CSV memiliki beberapa fungsi:

1. Menyimpan hasil analisis secara terstruktur.
2. Memudahkan pemeriksaan ulang oleh dosen.
3. Memudahkan pembuatan grafik ulang.
4. Memudahkan integrasi dengan laporan.
5. Memperkuat reproduibilitas praktikum.
6. Mengurangi risiko kehilangan data.
7. Menjadi arsip hasil praktikum.

Mahasiswa harus mengumpulkan CSV bersama file kode dan laporan. Jika laporan memuat tabel tetapi CSV tidak disertakan, pembaca sulit memverifikasi apakah tabel tersebut benar-benar dihasilkan dari kode.

11. Folder Output yang Dianjurkan

Agar output tidak tercecer, semua hasil kode sebaiknya disimpan dalam folder khusus. Folder yang dianjurkan adalah:

output_praktikum_04/

Isi folder tersebut:

<https://kasmui.cloud>

<https://kasmui.cloud/buku/>

<https://kasmui.cloud/aibuku/>

```
output_praktikum_04/
├── hasil_analisis_homo_lumo.csv
├── grafik_gap_homo_lumo.png
└── diagram_energi_orbital.png
```

Jika mahasiswa juga menyimpan salinan tabel dalam format spreadsheet, file tambahan dapat dimasukkan:

```
hasil_analisis_homo_lumo.xlsx
```

Namun, CSV tetap dianjurkan karena sederhana, ringan, dan mudah dibaca oleh berbagai program.

Struktur folder lengkap Praktikum 4 dapat menjadi:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo/
├── data/
│   └── data_homo_lumo_chemcompute.csv
├── kode/
│   └── praktikum_04_dft_homo_lumo.py
├── output_praktikum_04/
│   ├── hasil_analisis_homo_lumo.csv
│   ├── grafik_gap_homo_lumo.png
│   └── diagram_energi_orbital.png
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_04.docx
```

Folder ini membuat hubungan antara data, kode, output, dan laporan menjadi jelas.

12. Kriteria Output Kode yang Layak

Output kode dapat dianggap layak jika memenuhi beberapa kriteria berikut:

Kriteria	Penjelasan
Lengkap	Memuat tabel, grafik, diagram, dan CSV
Konsisten	Data pada tabel sama dengan grafik dan diagram
Terlabel	Setiap grafik memiliki judul, sumbu, dan satuan
Reprodusibel	Output dapat dibuat ulang dengan menjalankan kode
Tertelusur	Data dapat ditelusuri ke output software komputasi
Terbaca	Tabel dan grafik mudah dipahami
Relevan	Output mendukung analisis HOMO-LUMO dan reaktivitas
Tidak berlebihan	Output tidak menampilkan informasi yang tidak diperlukan
Disimpan rapi	Semua file berada pada folder yang jelas
Siap dilaporkan	Output dapat langsung digunakan dalam laporan praktikum

Kriteria tersebut penting agar mahasiswa tidak hanya menghasilkan file, tetapi menghasilkan file yang bernilai ilmiah. Dalam praktikum komputasi, kualitas output bukan ditentukan oleh banyaknya file, tetapi oleh keterhubungan antara data, metode, analisis, dan interpretasi.

13. Kesalahan Umum dalam Output Kode

Beberapa kesalahan umum yang sering muncul dalam output kode adalah:

Kesalahan	Dampak
CSV tidak tersimpan	Hasil sulit diverifikasi
Grafik tidak memiliki satuan	Pembaca tidak memahami skala energi
Nama molekul tidak konsisten	Data mudah tertukar
Tabel dan grafik memakai data berbeda	Laporan tidak konsisten
HOMO dan LUMO tertukar	Gap salah total
Gap bernilai negatif	Rumus atau input salah
Satuan Hartree dan eV tercampur	Parameter reaktivitas tidak valid
File output menimpa hasil lama tanpa catatan	Riwayat analisis hilang
Diagram terlalu ramai	Visualisasi sulit dibaca
Grafik tidak disimpan	Laporan tidak memiliki bukti visual

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari melalui pemeriksaan akhir. Setelah menjalankan kode, mahasiswa harus membuka CSV, melihat grafik, memeriksa diagram, dan memastikan semua data sesuai dengan input awal.

14. Pemeriksaan Akhir Output Kode

Sebelum output dimasukkan ke laporan, mahasiswa harus melakukan pemeriksaan akhir. Pemeriksaan ini dapat menggunakan daftar periksa berikut:

```
[ ] File praktikum_04_dft_homo_lumo.py dapat dijalankan tanpa error.
[ ] Data HOMO dan LUMO sesuai dengan output perhitungan.
[ ] Semua energi menggunakan satuan yang sama.
[ ] Gap dihitung dengan rumus LUMO - HOMO.
[ ] Tidak ada gap bernilai negatif.
[ ] Tabel HOMO, LUMO, dan gap sudah benar.
[ ] Tabel parameter reaktivitas global sudah benar.
[ ] File hasil_analisis_homo_lumo.csv tersimpan.
[ ] File grafik_gap_homo_lumo.png tersimpan.
[ ] File diagram_energi_orbital.png tersimpan.
[ ] Grafik memiliki judul, label sumbu, dan satuan.
[ ] Diagram energi orbital dapat dibaca.
[ ] Semua file berada dalam folder output_praktikum_04.
[ ] Output siap dimasukkan ke laporan.
```

Daftar periksa ini tampak sederhana, tetapi sangat penting. Banyak kesalahan praktikum terjadi bukan karena mahasiswa tidak memahami teori, melainkan karena data tidak diperiksa sebelum dilaporkan.

15. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum

Output kode harus masuk ke laporan praktikum dalam bentuk yang jelas. Laporan tidak boleh hanya menyebut bahwa kode telah dijalankan. Laporan harus menyajikan hasil dan analisis.

Struktur penyajian dalam laporan dapat berupa:

1. Tabel HOMO, LUMO, dan gap.
2. Grafik gap HOMO-LUMO.
3. Diagram tingkat energi orbital.
4. Tabel parameter reaktivitas global.
5. Pembahasan perbandingan antarmolekul.
6. Keterbatasan interpretasi.

Contoh paragraf laporan:

Kode praktikum_04_dft_homo_lumo.py menghasilkan tabel energi HOMO, LUMO, dan gap HOMO-LUMO untuk lima molekul model. Hasil ini kemudian digunakan untuk menghitung hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilisitas. Grafik gap HOMO-LUMO menunjukkan perbedaan karakter elektronik antarmolekul, terutama antara etilena dan butadiena serta antara benzena dan nitrobenzena. Diagram energi orbital membantu melihat posisi relatif HOMO dan LUMO, sehingga interpretasi tidak hanya bergantung pada nilai gap.

Paragraf seperti ini menunjukkan bahwa output kode telah digunakan sebagai dasar pembahasan, bukan hanya ditempel sebagai gambar.

16. Implikasi Ilmiah Output Kode

Output kode memiliki implikasi ilmiah karena mengubah data mentah menjadi argumen. Tabel dan grafik memungkinkan mahasiswa membuat perbandingan yang lebih objektif. Diagram energi orbital membantu mahasiswa memahami posisi HOMO dan LUMO. Parameter reaktivitas global memberi dasar untuk menafsirkan stabilitas, softness, dan elektrofilisitas.

Namun, output kode juga menuntut tanggung jawab ilmiah. Grafik yang indah tidak selalu berarti analisis benar. CSV yang rapi tidak selalu berarti data valid. Diagram yang menarik tidak selalu berarti interpretasi tepat. Kualitas ilmiah tetap bergantung pada:

1. Kebenaran data awal.

2. Ketepatan rumus.
3. Konsistensi satuan.
4. Validitas output perhitungan.
5. Kesesuaian metode.
6. Kewajaran interpretasi kimia.
7. Kesadaran terhadap batas model.

Dalam konteks kimia kuantum, angka selalu berasal dari model. Model memiliki asumsi dan batas. Oleh karena itu, output kode harus dibaca sebagai hasil analisis berbasis model, bukan kebenaran mutlak.

17. Implikasi Pedagogis Output Kode

Secara pedagogis, output kode membantu mahasiswa mengembangkan literasi komputasi dan literasi data. Mereka belajar bahwa praktikum modern tidak hanya menghasilkan jawaban akhir, tetapi juga menghasilkan jejak analisis. Jejak tersebut berupa kode, CSV, grafik, diagram, dan laporan.

Output kode juga membantu mahasiswa mengembangkan keterampilan berpikir ilmiah. Ketika melihat tabel, mahasiswa belajar membandingkan angka. Ketika melihat grafik, mahasiswa belajar mengenali pola. Ketika melihat diagram energi, mahasiswa belajar memahami hubungan tingkat orbital. Ketika menghitung parameter reaktivitas, mahasiswa belajar menghubungkan angka dengan konsep kimia.

Praktikum 4 menjadi lebih bermakna karena mahasiswa tidak hanya memvisualisasikan molekul, tetapi juga membangun argumen berbasis data. Inilah salah satu tujuan utama pembelajaran kimia komputasi: menjadikan mahasiswa mampu berpikir melalui model, data, visualisasi, dan interpretasi.

18. Transisi ke Analisis

Subbab 7.8 telah membahas output kode yang wajib dihasilkan dalam Praktikum 4. Output tersebut meliputi tabel HOMO, LUMO, dan gap; diagram energi orbital; grafik gap HOMO-LUMO; tabel parameter reaktivitas global; serta file CSV hasil analisis. Semua output ini menjadi dasar bagi pembahasan ilmiah yang lebih mendalam.

Subbab berikutnya akan membahas analisis. Pada subbab 7.9, mahasiswa akan diarahkan menghubungkan gap HOMO-LUMO dengan stabilitas, reaktivitas, konjugasi, dan pengaruh substituen. Jika subbab 7.8 menekankan bentuk output, maka subbab 7.9 akan menekankan cara membaca makna output tersebut secara kimiawi, kritis, dan tidak berlebihan.

7.9 Analisis

Analisis dalam Praktikum 4 merupakan tahap ketika mahasiswa menghubungkan data hasil perhitungan dengan makna kimia. Pada subbab sebelumnya, mahasiswa telah memperoleh output berupa tabel HOMO, LUMO, gap HOMO-LUMO, diagram energi orbital, grafik gap, tabel parameter reaktivitas global, dan file CSV hasil analisis. Semua output tersebut belum menjadi kesimpulan ilmiah jika belum ditafsirkan. Oleh karena itu, subbab 7.9 berfungsi sebagai jembatan antara **data komputasi** dan **argumentasi kimia**.

Fokus utama analisis Praktikum 4 adalah menghubungkan **gap HOMO-LUMO** dengan **stabilitas, reaktivitas, konjugasi, dan pengaruh substituen**. Mahasiswa harus memahami bahwa angka gap bukan sekadar hasil perhitungan, tetapi indikator elektronik yang dapat membantu membaca kecenderungan suatu molekul. Akan tetapi, indikator tersebut harus digunakan secara hati-hati. Gap HOMO-LUMO bukan hukum tunggal yang secara otomatis menentukan semua jenis reaksi. Ia merupakan salah satu alat interpretasi dalam kerangka teori orbital molekul, DFT konseptual, dan teori orbital frontier.

Dalam praktikum ini, analisis dilakukan terhadap lima molekul model: **etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena**. Kelima molekul tersebut dipilih karena masing-masing memperlihatkan aspek reaktivitas yang berbeda. Etilena menunjukkan sistem π sederhana. Butadiena menunjukkan pengaruh konjugasi. Benzena menunjukkan delokalisasi aromatik. Formaldehida menunjukkan peran gugus karbonil sebagai akseptor elektron. Nitrobenzena menunjukkan pengaruh substituen penarik elektron terhadap struktur elektronik cincin aromatik.

Dengan demikian, analisis dalam subbab ini tidak boleh berhenti pada kalimat seperti “gap molekul A lebih kecil daripada molekul B”. Analisis yang baik harus menjawab pertanyaan lebih dalam: **mengapa gap tersebut berbeda, apa hubungan perbedaan itu dengan struktur molekul, bagaimana pengaruhnya terhadap reaktivitas, dan apa batas interpretasinya?**

1. Makna Analisis dalam Praktikum HOMO-LUMO

Analisis adalah proses menafsirkan data berdasarkan teori. Dalam Praktikum 4, data utama berupa energi HOMO, energi LUMO, gap HOMO-LUMO, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas. Teori yang digunakan meliputi teori orbital molekul, teori orbital frontier, DFT, DFT konseptual, efek konjugasi, aromaticitas, efek induktif, dan efek resonansi.

Secara sederhana, hubungan antara data dan teori dapat ditulis sebagai berikut:

```
data HOMO-LUMO
→ dihitung menjadi gap dan parameter reaktivitas
→ dibandingkan antarmolekul
→ dihubungkan dengan struktur elektronik
→ ditafsirkan berdasarkan teori kimia
→ dirumuskan menjadi kesimpulan ilmiah
```

Mahasiswa harus memahami bahwa data tidak berbicara sendiri. Angka gap, hardness, atau elektrofilisitas memerlukan tafsir. Tafsir tersebut harus didasarkan pada konsep yang benar. Jika tidak, data komputasi dapat disalahgunakan untuk mendukung kesimpulan yang terlalu sederhana atau bahkan keliru.

Misalnya, jika butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena, mahasiswa tidak boleh hanya menyimpulkan bahwa butadiena “lebih reaktif”. Kesimpulan yang lebih baik adalah bahwa sistem π terkonjugasi pada butadiena menyebabkan delokalisasi elektron lebih luas, sehingga pemisahan energi antara orbital terisi tertinggi dan orbital kosong terendah menjadi lebih kecil. Gap yang lebih kecil tersebut dapat menunjukkan kecenderungan lebih mudah mengalami interaksi elektronik atau transisi tertentu, tetapi reaktivitas aktual tetap bergantung pada mekanisme reaksi.

Dengan demikian, analisis harus bersifat **kontekstual, kritis, dan tidak absolut**.

2. Gap HOMO-LUMO sebagai Indikator Stabilitas Elektronik

Gap HOMO-LUMO adalah selisih energi antara LUMO dan HOMO:

$$\text{Gap} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

Secara umum, gap besar sering dikaitkan dengan stabilitas elektronik yang lebih tinggi. Molekul dengan gap besar memiliki pemisahan energi yang lebih jauh antara orbital terisi tertinggi dan orbital kosong terendah. Hal ini berarti elektron pada HOMO memerlukan energi lebih besar untuk berpindah ke LUMO atau untuk terlibat dalam interaksi elektronik tertentu.

Sebaliknya, gap kecil sering dikaitkan dengan kestabilan elektronik yang lebih rendah secara relatif atau kemudahan mengalami perubahan distribusi elektron. Molekul dengan gap kecil lebih mudah mengalami polarisasi, eksitasi elektronik, atau interaksi donor-akseptor dalam konteks tertentu.

Secara konseptual:

gap besar

- pemisahan orbital frontier besar
- perubahan distribusi elektron relatif lebih sulit
- stabilitas elektronik relatif lebih tinggi

gap kecil

- pemisahan orbital frontier kecil
- perubahan distribusi elektron relatif lebih mudah
- reaktivitas elektronik relatif lebih tinggi

Namun, hubungan ini harus ditafsirkan sebagai kecenderungan umum, bukan hukum mutlak. Stabilitas molekul tidak hanya ditentukan oleh gap HOMO-LUMO. Faktor lain seperti energi total, geometri, strain, aromaticitas, efek pelarut, muatan, spin, dan kondisi reaksi juga penting.

Sebagai contoh, benzena dapat memiliki stabilitas aromatik yang tinggi karena delokalisasi enam elektron π dalam cincin planar. Stabilitas benzena tidak cukup dijelaskan hanya dari gap HOMO-LUMO. Aromaticitas melibatkan konsep siklisitas, planaritas, konjugasi penuh, jumlah elektron π , dan kestabilan energi. Gap HOMO-LUMO dapat mendukung pembacaan struktur elektronik benzena, tetapi bukan satu-satunya dasar untuk menyatakan aromaticitas.

Dengan demikian, analisis gap harus selalu dikaitkan dengan struktur molekul dan konsep kimia yang lebih luas.

3. Gap HOMO-LUMO dan Reaktivitas Molekul

Reaktivitas molekul berkaitan dengan kecenderungan molekul untuk mengalami perubahan kimia. Dalam teori orbital frontier, reaktivitas sering dianalisis melalui interaksi antara HOMO dan LUMO. HOMO berkaitan dengan kemampuan molekul menyumbangkan elektron, sedangkan LUMO berkaitan dengan kemampuan molekul menerima elektron.

Dalam konteks ini:

HOMO tinggi
→ kecenderungan donor elektron lebih besar

LUMO rendah
→ kecenderungan akseptor elektron lebih besar

gap kecil
→ interaksi HOMO-LUMO relatif lebih mudah

Namun, reaktivitas tidak boleh disederhanakan hanya menjadi gap kecil atau besar. Reaktivitas kimia juga ditentukan oleh orientasi orbital, tumpang tindih orbital, muatan, sterik, pelarut, suhu, katalis, dan mekanisme reaksi. Molekul dengan gap kecil belum tentu paling reaktif dalam semua reaksi. Molekul dengan gap besar belum tentu inert dalam semua kondisi.

Analisis yang baik menggunakan bahasa yang proporsional. Misalnya:

Dalam data praktikum ini, molekul X memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada molekul Y. Hal ini menunjukkan bahwa secara elektronik molekul X cenderung lebih mudah mengalami perubahan distribusi elektron. Namun, reaktivitas aktual tetap bergantung pada jenis reaksi, orientasi orbital, struktur molekul, dan kondisi lingkungan.

Pernyataan tersebut lebih ilmiah daripada:

Molekul X pasti lebih reaktif daripada molekul Y.

Dalam laporan praktikum, mahasiswa harus membiasakan diri menggunakan istilah seperti **cenderung, secara relatif, dalam data ini, berdasarkan indikator global, dan perlu ditafsirkan bersama faktor lain**. Bahasa seperti ini menunjukkan kematangan ilmiah.

4. Analisis Etilena sebagai Sistem π Sederhana

Etilena merupakan molekul model paling sederhana dalam Praktikum 4. Molekul ini memiliki satu ikatan rangkap $C=C$ yang terdiri atas satu ikatan σ dan satu ikatan π . Dalam analisis HOMO-LUMO, HOMO etilena biasanya berkaitan dengan orbital π terisi, sedangkan LUMO berkaitan dengan orbital π^* kosong.

Etilena berfungsi sebagai acuan dasar untuk sistem π . Karena sistem π etilena hanya melibatkan dua atom karbon, delokalisasi elektronnya terbatas. Oleh karena itu, gap HOMO-LUMO etilena dapat digunakan sebagai pembanding ketika mahasiswa menganalisis butadiena yang memiliki sistem π lebih panjang.

Analisis yang dapat ditulis mahasiswa:

Pada etilena, HOMO berkaitan dengan orbital π pada ikatan rangkap $C=C$, sedangkan LUMO berkaitan dengan orbital π^* . Karena sistem π hanya melibatkan dua atom karbon, delokalisasi elektron relatif terbatas. Gap HOMO-LUMO etilena menjadi acuan untuk membandingkan pengaruh perluasan konjugasi pada butadiena.

Etilena juga membantu mahasiswa memahami bahwa bentuk orbital penting. Jika visualisasi HOMO menunjukkan distribusi orbital pada ikatan $C=C$, mahasiswa dapat mengaitkan HOMO dengan kemampuan ikatan π untuk menyumbangkan elektron kepada elektrofil dalam konteks reaksi tertentu. Jika visualisasi LUMO menunjukkan orbital π^* , mahasiswa dapat memahami bahwa orbital kosong tersebut dapat berperan dalam interaksi dengan donor elektron tertentu.

Namun, dalam laporan, etilena tidak boleh dianalisis secara terpisah saja. Fungsi utama etilena adalah sebagai molekul pembanding. Tanpa perbandingan dengan butadiena, makna pedagogis etilena menjadi kurang kuat.

5. Analisis Butadiena dan Pengaruh Konjugasi

Butadiena merupakan molekul kunci untuk memahami pengaruh konjugasi terhadap gap HOMO-LUMO. Dalam 1,3-butadiena, dua ikatan rangkap dipisahkan oleh satu ikatan tunggal sehingga orbital p pada empat atom karbon dapat berinteraksi. Interaksi ini menghasilkan sistem π terkonjugasi.

Konjugasi menyebabkan elektron π tidak terlokalisasi hanya pada satu ikatan rangkap, melainkan menyebar pada beberapa atom. Delokalisasi ini mengubah energi orbital molekul. Secara umum, semakin luas sistem konjugasi, semakin rapat tingkat energi orbital π , sehingga gap HOMO-LUMO cenderung mengecil.

Perbandingan konseptual:

etilena

- sistem π pendek
- delokalisasi terbatas
- gap relatif lebih besar

butadiena

- sistem π terkonjugasi
- delokalisasi lebih luas
- gap relatif lebih kecil

Jika data praktikum menunjukkan bahwa gap butadiena lebih kecil daripada etilena, maka mahasiswa harus menghubungkannya dengan delokalisasi elektron π . Analisis yang baik adalah:

Butadiena memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada etilena. Perbedaan ini dapat dijelaskan melalui sistem π terkonjugasi pada butadiena. Delokalisasi elektron π pada empat atom karbon menyebabkan tingkat energi orbital frontier menjadi lebih rapat dibanding etilena yang hanya memiliki satu ikatan π . Dengan demikian, gap yang lebih kecil pada butadiena dapat dipahami sebagai konsekuensi dari perluasan konjugasi.

Analisis tersebut menghubungkan data, struktur, dan teori. Mahasiswa tidak hanya menyebut angka, tetapi menjelaskan penyebab kimianya.

Namun, mahasiswa perlu berhati-hati dalam menghubungkan gap dengan reaktivitas. Butadiena memang memiliki sistem π yang penting dalam reaksi seperti adisi dan reaksi perisiklik, tetapi Praktikum 4 tidak menghitung mekanisme reaksi. Oleh karena itu, kesimpulan harus dibatasi pada reaktivitas elektronik global dan kecenderungan orbital frontier.

6. Analisis Benzena dan Delokalisasi Aromatik

Benzena merupakan molekul aromatik klasik. Molekul ini memiliki enam elektron π yang terdelokalisasi dalam cincin planar. Dalam kimia organik, benzena sering digambarkan dengan dua struktur Kekulé yang beresonansi. Dalam teori orbital molekul, benzena lebih tepat dipahami sebagai sistem dengan orbital π yang terdelokalisasi pada seluruh cincin.

Analisis benzena dalam Praktikum 4 memiliki dua fungsi utama. Pertama, benzena digunakan untuk memahami delokalisasi aromatik. Kedua, benzena digunakan sebagai pembanding untuk nitrobenzena. Dengan membandingkan benzena dan nitrobenzena, mahasiswa dapat melihat bagaimana substituen nitro mengubah struktur elektronik cincin aromatik.

Pada benzena, HOMO dan LUMO dapat memperlihatkan distribusi orbital pada sistem π cincin. Visualisasi orbital sangat penting karena angka energi saja belum cukup menunjukkan karakter aromatik. Mahasiswa dapat memperhatikan apakah orbital tersebar pada cincin, bagaimana pola fase orbital, dan bagaimana energi HOMO-LUMO benzena dibandingkan dengan molekul lain.

Contoh analisis:

Benzena menunjukkan karakter sistem π aromatik dengan delokalisasi elektron pada cincin. HOMO dan LUMO benzena tidak terlokalisasi pada satu ikatan tertentu, tetapi berkaitan dengan sistem π cincin secara keseluruhan. Delokalisasi ini menjadi salah satu dasar stabilitas aromatik benzena. Dalam Praktikum 4, benzena juga digunakan sebagai acuan untuk menilai pengaruh gugus nitro pada nitrobenzena.

Mahasiswa harus memahami bahwa aromaticitas tidak boleh disimpulkan hanya dari satu angka gap. Aromaticitas merupakan konsep yang lebih luas. Gap HOMO-LUMO dapat menjadi salah satu indikator struktur elektronik, tetapi tidak menggantikan kriteria aromaticitas seperti siklisitas, planaritas, konjugasi penuh, dan jumlah elektron π .

7. Analisis Formaldehida sebagai Akseptor Elektron

Formaldehida merupakan model sederhana gugus karbonil. Molekul ini memiliki ikatan C=O yang polar. Oksigen lebih elektronegatif daripada karbon sehingga ikatan karbonil memiliki distribusi muatan yang tidak merata. Dalam kimia organik, karbon karbonil sering menjadi pusat serangan nukleofilik karena dapat menerima pasangan elektron.

Dalam analisis HOMO-LUMO, formaldehida penting karena LUMO-nya sering berkaitan dengan orbital π^* karbonil. Orbital π^* ini dapat berperan sebagai orbital akseptor elektron. Jika visualisasi LUMO menunjukkan kontribusi pada gugus C=O, mahasiswa dapat mengaitkannya dengan reaktivitas karbonil terhadap nukleofil.

Analisis yang baik:

Pada formaldehida, LUMO berkaitan dengan orbital π^* gugus karbonil. Orbital ini dapat menerima donasi elektron dari nukleofil dalam konteks reaksi adisi nukleofilik. Oleh karena itu, formaldehida dapat dipahami sebagai model sederhana akseptor elektron. Nilai LUMO dan indeks elektrofilitas global dapat membantu membaca kecenderungan ini, tetapi lokasi reaktivitas tetap harus didukung oleh visualisasi LUMO dan pemahaman polaritas ikatan C=O.

Analisis formaldehida menuntut mahasiswa menggabungkan tiga hal:

1. Energi LUMO.
2. Bentuk LUMO.
3. Polaritas gugus karbonil.

Jika hanya menggunakan energi LUMO tanpa melihat bentuk orbital, mahasiswa tidak dapat menjelaskan mengapa bagian karbonil penting. Jika hanya melihat struktur Lewis tanpa data orbital, mahasiswa belum menggunakan hasil komputasi secara optimal. Analisis terbaik menggabungkan keduanya.

8. Analisis Nitrobenzena dan Pengaruh Substituen

Nitrobenzena digunakan untuk menganalisis pengaruh substituen penarik elektron terhadap sistem aromatik. Gugus nitro $-\text{NO}_2$ merupakan substituen penarik elektron kuat melalui efek induktif dan resonansi. Dalam konteks orbital molekul, gugus nitro dapat mengubah energi dan distribusi HOMO-LUMO pada cincin benzena.

Perbandingan utama adalah benzena dan nitrobenzena:

benzena

→ cincin aromatik tanpa substituen

nitrobenzena

→ cincin aromatik dengan gugus NO_2

→ gugus NO_2 menarik elektron

→ distribusi orbital berubah

→ energi HOMO-LUMO dapat berubah

Jika data menunjukkan bahwa LUMO nitrobenzena lebih rendah daripada LUMO benzena, hal ini dapat dikaitkan dengan sifat gugus nitro sebagai penarik elektron. Gugus nitro dapat menstabilkan orbital kosong tertentu dan meningkatkan karakter akseptor elektron molekul secara global.

Contoh analisis:

Nitrobenzena menunjukkan perubahan struktur elektronik dibanding benzena akibat keberadaan gugus nitro. Gugus nitro sebagai substituen penarik elektron dapat menurunkan energi orbital kosong tertentu dan mengubah distribusi LUMO. Jika visualisasi LUMO menunjukkan kontribusi pada gugus nitro, hal ini mendukung pemahaman bahwa gugus nitro berperan sebagai bagian akseptor elektron dalam sistem molekul.

Mahasiswa perlu memahami bahwa pengaruh substituen tidak hanya mengubah posisi atom, tetapi mengubah keseluruhan struktur elektronik molekul. Inilah salah satu kekuatan analisis komputasi: efek substituen yang sering dijelaskan secara kualitatif dalam kimia organik dapat diperkuat dengan visualisasi orbital dan data energi orbital.

Namun, seperti analisis lain, kesimpulan harus proporsional. Nitrobenzena tidak boleh disebut “lebih reaktif dalam semua reaksi” hanya karena gap atau LUMO-nya berubah. Reaktivitas nitrobenzena bergantung pada jenis reaksi. Dalam substitusi aromatik elektrofilik, gugus nitro menurunkan kerapatan elektron cincin dan bersifat deaktivator. Dalam konteks lain, gugus nitro dapat berperan dalam interaksi akseptor elektron. Oleh karena itu, analisis harus menyebut konteks.

9. Analisis Hardness dan Softness

Hardness dan softness merupakan parameter reaktivitas global yang dihitung dari gap HOMO-LUMO. Hardness dirumuskan sebagai:

$$\eta = \text{Gap} / 2$$

Softness dirumuskan sebagai:

$$S = 1 / \eta$$

Secara konseptual, hardness menunjukkan resistensi molekul terhadap perubahan distribusi elektron. Softness menunjukkan kemudahan distribusi elektron berubah. Molekul dengan gap besar memiliki hardness besar dan softness kecil. Molekul dengan gap kecil memiliki hardness kecil dan softness besar.

Dalam analisis Praktikum 4, hardness dan softness dapat digunakan untuk memperkuat pembahasan gap. Misalnya, jika butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena, maka butadiena juga memiliki hardness lebih kecil dan softness lebih besar. Hal ini dapat dikaitkan dengan delokalisasi elektron π pada sistem terkonjugasi.

Contoh analisis:

Butadiena memiliki hardness lebih rendah dan softness lebih tinggi dibanding etilena dalam data praktikum ini. Pola tersebut sejalan dengan gap HOMO-LUMO yang lebih kecil pada butadiena. Secara konseptual, sistem π terkonjugasi pada butadiena lebih mudah mengalami perubahan distribusi elektron dibanding sistem π sederhana pada etilena.

Namun, hardness dan softness tetap parameter global. Ia tidak menunjukkan atom mana yang menjadi pusat reaksi. Oleh karena itu, mahasiswa harus menggabungkan parameter ini dengan visualisasi orbital.

10. Analisis Elektronegativitas Mulliken

Elektronegativitas Mulliken dalam Praktikum 4 dihitung dari energi HOMO dan LUMO:

$$\chi = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2$$

Parameter ini menggambarkan kecenderungan molekul menarik elektron secara global. Dalam konteks molekul, elektronegativitas Mulliken bukan elektronegativitas unsur seperti pada tabel periodik, melainkan parameter global yang dihitung dari orbital frontier.

Analisis elektronegativitas Mulliken berguna untuk membandingkan molekul yang memiliki gugus penarik elektron. Nitrobenzena, misalnya, dapat menunjukkan karakter menarik elektron

yang lebih kuat dibanding benzena karena adanya gugus nitro. Formaldehida juga dapat menunjukkan karakter akseptor tertentu karena gugus karbonil.

Contoh analisis:

Jika elektronegativitas Mulliken nitrobenzena lebih tinggi daripada benzena, hasil tersebut dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron. Gugus nitro mengubah distribusi elektron cincin aromatik dan dapat meningkatkan kecenderungan molekul menarik elektron secara global.

Namun, mahasiswa harus menyadari bahwa elektronegativitas Mulliken dihitung dari energi orbital yang bergantung pada metode. Jika metode, fungsional, basis set, atau geometri berubah, nilai dapat berubah. Oleh karena itu, analisis hanya sah untuk data yang dihitung secara konsisten.

11. Analisis Indeks Elektrofilitas

Indeks elektrofilitas sederhana dihitung dengan rumus:

$$\omega = \chi^2 / (2\eta)$$

Indeks ini menunjukkan kecenderungan global molekul untuk menerima elektron. Molekul dengan nilai elektrofilitas lebih tinggi dapat dianggap memiliki karakter elektrofilik global lebih besar dalam kerangka parameter yang digunakan.

Dalam Praktikum 4, indeks elektrofilitas penting untuk membahas formaldehida dan nitrobenzena. Formaldehida memiliki gugus karbonil yang dapat menerima elektron melalui orbital π^* C=O. Nitrobenzena memiliki gugus nitro yang menarik elektron dan dapat memengaruhi karakter akseptor molekul secara keseluruhan.

Contoh analisis formaldehida:

Nilai indeks elektrofilitas formaldehida dapat dikaitkan dengan keberadaan gugus karbonil. Secara kimia, gugus karbonil memiliki orbital π^* yang dapat menerima donasi elektron dari nukleofil. Oleh karena itu, nilai elektrofilitas global dapat mendukung pemahaman formaldehida sebagai model sederhana akseptor elektron.

Contoh analisis nitrobenzena:

Nilai elektrofilitas nitrobenzena dapat dipengaruhi oleh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron. Jika LUMO nitrobenzena relatif rendah dan indeks elektrofilitasnya relatif tinggi, maka hal tersebut dapat menunjukkan kecenderungan global molekul untuk menerima elektron. Namun, interpretasi ini tetap harus dikaitkan dengan distribusi LUMO dan jenis reaksi yang dibahas.

Indeks elektrofilitas sangat berguna, tetapi juga mudah disalahgunakan. Mahasiswa tidak boleh menyimpulkan lokasi reaksi hanya dari nilai ω . Indeks ini global, bukan lokal.

12. Menghubungkan Data Numerik dengan Visualisasi Orbital

Analisis Praktikum 4 harus menggabungkan data numerik dan visualisasi orbital. Tabel HOMO-LUMO memberikan angka. Grafik gap memberikan pola perbandingan. Diagram energi orbital memberikan posisi relatif. Visualisasi HOMO dan LUMO menunjukkan lokasi orbital pada molekul.

Hubungan antara keduanya dapat ditulis sebagai berikut:

angka HOMO-LUMO

→ menunjukkan kecenderungan energi

visualisasi orbital

→ menunjukkan lokasi dan bentuk orbital

analisis kimia

→ menghubungkan energi, bentuk orbital, dan struktur molekul

Misalnya, jika formaldehida memiliki LUMO rendah, mahasiswa perlu melihat apakah LUMO tersebut berada pada gugus karbonil. Jika ya, maka analisis sebagai akseptor elektron menjadi lebih kuat. Jika nitrobenzena memiliki LUMO rendah, mahasiswa perlu melihat apakah LUMO tersebut banyak berkontribusi pada gugus nitro atau cincin aromatik.

Tanpa visualisasi orbital, analisis dapat menjadi terlalu global. Tanpa data numerik, visualisasi dapat menjadi terlalu kualitatif. Keduanya harus saling melengkapi.

13. Contoh Pola Analisis Antarmolekul

Mahasiswa dapat menyusun analisis antarmolekul dengan pola berikut.

a. Etilena vs Butadiena

Fokus: pengaruh konjugasi.

Etilena memiliki satu ikatan π , sedangkan butadiena memiliki sistem π terkonjugasi. Jika gap HOMO-LUMO butadiena lebih kecil daripada etilena, hal ini dapat dikaitkan dengan delokalisasi elektron π yang lebih luas pada butadiena. Delokalisasi menyebabkan tingkat energi orbital menjadi lebih rapat sehingga gap menurun.

b. Benzena vs Nitrobenzena

Fokus: pengaruh substituen.

Benzena merupakan sistem aromatik tanpa substituen, sedangkan nitrobenzena memiliki gugus nitro sebagai substituen penarik elektron. Jika LUMO nitrobenzena lebih rendah daripada benzena atau gap-nya berubah signifikan, hal ini dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro terhadap struktur elektronik cincin aromatik.

c. Formaldehida sebagai Molekul Karbonil

Fokus: akseptor elektron.

Formaldehida mengandung gugus karbonil $C=O$. LUMO formaldehida dapat berkaitan dengan orbital π^* karbonil yang berperan sebagai akseptor elektron. Oleh karena itu, formaldehida menjadi model sederhana untuk memahami reaktivitas karbonil terhadap nukleofil.

d. Benzena vs Butadiena

Fokus: delokalisasi linear dan siklik.

Butadiena memiliki delokalisasi π linear, sedangkan benzena memiliki delokalisasi π siklik aromatik. Perbandingan keduanya memperlihatkan bahwa delokalisasi tidak hanya ditentukan oleh panjang sistem π , tetapi juga oleh bentuk, simetri, dan karakter aromatik.

Pola seperti ini membuat analisis lebih terarah dan tidak hanya berupa daftar angka.

14. Bahasa Ilmiah dalam Menulis Analisis

Bahasa analisis harus hati-hati. Hindari kalimat yang terlalu mutlak. Gunakan kata yang menunjukkan kecenderungan dan batas interpretasi.

Bahasa yang dianjurkan:

menunjukkan kecenderungan
dapat dikaitkan dengan
secara relatif
dalam data praktikum ini
berdasarkan indikator global
perlu didukung oleh visualisasi orbital
perlu ditafsirkan bersama struktur molekul

Bahasa yang sebaiknya dihindari:

pasti paling reaktif
sudah terbukti mutlak
selalu bereaksi
hanya disebabkan oleh gap
tidak perlu analisis lain

Contoh perbaikan kalimat:

Kurang tepat:

Nitrobenzena paling reaktif karena gap-nya paling kecil.

Lebih tepat:

Dalam data praktikum ini, nitrobenzena menunjukkan gap HOMO-LUMO yang relatif kecil. Pola tersebut dapat dikaitkan dengan pengaruh gugus nitro terhadap struktur elektronik molekul. Namun, reaktivitas nitrobenzena tetap harus ditafsirkan berdasarkan jenis reaksi, distribusi orbital, dan efek substituen.

Bahasa seperti ini mencerminkan sikap ilmiah yang kritis.

15. Kesalahan Umum dalam Analisis

Beberapa kesalahan umum dalam analisis Praktikum 4 adalah:

Kesalahan	Dampak
Menafsirkan gap sebagai satu-satunya ukuran reaktivitas	Analisis menjadi terlalu sederhana
Tidak menghubungkan data dengan struktur molekul	Angka tidak bermakna kimia
Tidak membandingkan molekul acuan	Kesimpulan lemah
Mengabaikan visualisasi orbital	Lokasi reaktivitas tidak jelas
Menganggap warna orbital sebagai muatan	Interpretasi visual salah
Tidak menyebut metode dan basis set	Data tidak dapat dievaluasi
Membandingkan hasil dari metode berbeda	Perbandingan tidak valid
Menyimpulkan terlalu mutlak	Tidak sesuai sikap ilmiah
Tidak membahas batas analisis	Laporan tampak tidak kritis
Tidak membedakan parameter global dan lokal	Kesimpulan lokasi reaksi keliru

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari agar laporan praktikum tidak hanya tampak lengkap secara format, tetapi juga kuat secara ilmiah.

16. Struktur Analisis yang Dianjurkan dalam Laporan

Agar analisis tersusun rapi, mahasiswa dapat menggunakan urutan berikut:

1. Menyebutkan metode, fungsional, basis set, software, dan molekul model.
2. Menjelaskan sumber data HOMO dan LUMO.
3. Menyajikan tabel HOMO, LUMO, dan gap.
4. Menjelaskan pola umum gap antarmolekul.
5. Membandingkan etilena dan butadiena.
6. Membandingkan benzena dan nitrobenzena.
7. Membahas formaldehida sebagai model karbonil.

8. Membahas hardness dan softness.
9. Membahas elektronegativitas Mulliken dan elektrofilisitas.
10. Mengaitkan analisis dengan visualisasi orbital.
11. Menyampaikan batas interpretasi.
12. Menulis kesimpulan sementara.

Contoh paragraf pembuka analisis:

Analisis dilakukan berdasarkan energi HOMO dan LUMO yang diperoleh dari output perhitungan DFT. Data tersebut digunakan untuk menghitung gap HOMO-LUMO, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilisitas. Kelima molekul model dibandingkan untuk melihat pengaruh konjugasi, aromaticitas, gugus karbonil, dan substituen penarik elektron terhadap struktur elektronik molekul.

Contoh paragraf penutup analisis:

Secara keseluruhan, hasil analisis menunjukkan bahwa perubahan struktur molekul memengaruhi energi orbital frontier. Konjugasi pada butadiena dapat memperkecil gap dibanding etilena, sedangkan gugus nitro pada nitrobenzena dapat mengubah distribusi orbital dibanding benzena. Formaldehida menunjukkan karakter penting gugus karbonil sebagai akseptor elektron. Namun, seluruh kesimpulan tersebut harus dipahami sebagai interpretasi berbasis model dan perlu ditafsirkan bersama visualisasi orbital serta konteks reaksi.

17. Implikasi Keilmuan Analisis HOMO-LUMO

Analisis HOMO-LUMO memiliki implikasi keilmuan yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa reaktivitas molekul dapat dibaca melalui struktur elektronik. Konsep donor dan akseptor elektron tidak hanya dijelaskan melalui struktur Lewis, tetapi juga melalui energi dan bentuk orbital molekul.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa konjugasi memiliki konsekuensi kuantitatif. Perluasan sistem π dapat memengaruhi gap HOMO-LUMO. Hal ini menghubungkan kimia organik dengan kimia kuantum.

Ketiga, mahasiswa belajar bahwa substituen mengubah struktur elektronik. Gugus nitro pada nitrobenzena tidak hanya menambah atom pada cincin benzena, tetapi juga mengubah distribusi elektron dan energi orbital.

Keempat, mahasiswa belajar bahwa parameter global seperti hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan elektrofilisitas dapat membantu membandingkan molekul, tetapi tidak boleh digunakan secara terpisah dari teori dan visualisasi orbital.

Kelima, mahasiswa belajar bahwa model komputasi harus dibaca secara kritis. Tidak semua angka yang dihasilkan software dapat langsung dijadikan kesimpulan. Setiap angka harus dikaitkan dengan metode, basis set, fungsional, geometri, dan validitas output.

18. Implikasi Pedagogis Analisis Praktikum 4

Secara pedagogis, subbab analisis ini sangat penting karena melatih mahasiswa berpikir melampaui prosedur. Mahasiswa tidak hanya belajar menjalankan ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, atau Python. Mereka belajar menjawab pertanyaan kimia berdasarkan data.

Pertanyaan yang harus muncul dalam benak mahasiswa bukan hanya:

Apakah kode berjalan?

melainkan:

Apa makna hasil kode?

Mengapa gap molekul ini lebih kecil?

Bagaimana konjugasi memengaruhi orbital?

Bagaimana substituen memengaruhi distribusi elektron?

Apakah kesimpulan saya terlalu mutlak?

Apa batas data yang saya gunakan?

Dengan cara ini, Praktikum 4 membentuk keterampilan berpikir ilmiah yang penting: membaca data, membandingkan pola, menghubungkan teori, menyusun argumen, dan menyadari batas model. Inilah inti praktikum kimia kuantum berbasis komputasi.

19. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Subbab 7.9 telah membahas cara menganalisis hasil Praktikum 4 dengan menghubungkan gap HOMO-LUMO dengan stabilitas, reaktivitas, konjugasi, dan pengaruh substituen. Analisis ini menegaskan bahwa HOMO-LUMO bukan hanya data numerik, tetapi alat untuk membaca struktur elektronik molekul. Namun, analisis harus dilakukan secara kritis, proporsional, dan tidak berlebihan.

Subbab berikutnya akan menyajikan pertanyaan diskusi. Pertanyaan tersebut akan menguji pemahaman mahasiswa tentang arti HOMO dalam reaksi kimia, arti LUMO dalam reaksi kimia, alasan butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena, serta pengaruh gugus nitro terhadap distribusi elektron. Dengan demikian, subbab 7.10 akan menjadi ruang refleksi konseptual agar mahasiswa dapat mengubah hasil praktikum menjadi pemahaman kimia yang lebih matang.

7.10 Pertanyaan Diskusi

Subbab 7.10 merupakan ruang refleksi konseptual setelah mahasiswa menjalankan Praktikum 4 tentang **DFT, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul**. Pada tahap ini, mahasiswa tidak lagi hanya diminta mengambil nilai HOMO, LUMO, gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, atau indeks elektrofilisitas dari output dan kode Python. Mahasiswa harus mampu

menjelaskan makna kimia dari data tersebut. Pertanyaan diskusi berfungsi untuk memastikan bahwa praktikum tidak berhenti pada keterampilan teknis, tetapi berkembang menjadi pemahaman konseptual yang kritis.

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 4 adalah:

1. **Apa arti HOMO dalam reaksi kimia?**
2. **Apa arti LUMO dalam reaksi kimia?**
3. **Mengapa butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena?**
4. **Bagaimana gugus nitro memengaruhi distribusi elektron?**

Keempat pertanyaan tersebut mewakili inti Praktikum 4. Pertanyaan pertama dan kedua menguji pemahaman mahasiswa tentang teori orbital frontier. Pertanyaan ketiga menguji pemahaman tentang konjugasi dan delokalisasi elektron π . Pertanyaan keempat menguji pemahaman tentang efek substituen penarik elektron terhadap struktur elektronik molekul aromatik. Dengan demikian, subbab ini menjadi penguat konseptual sebelum mahasiswa menyusun kesimpulan akhir praktikum.

1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum Kimia Komputasi

Pertanyaan diskusi dalam praktikum kimia komputasi memiliki fungsi yang berbeda dari pertanyaan hafalan. Pertanyaan ini tidak hanya menanyakan definisi, tetapi menuntut mahasiswa menghubungkan data, teori, visualisasi, dan interpretasi. Dalam Praktikum 4, mahasiswa telah memperoleh data HOMO-LUMO melalui perhitungan DFT atau semiempiris, memprosesnya dengan Python, dan menghasilkan tabel serta grafik. Namun, semua data tersebut belum cukup jika mahasiswa belum mampu menjelaskan maknanya.

Fungsi utama pertanyaan diskusi adalah:

1. Menguji pemahaman teori orbital molekul.
2. Menghubungkan hasil komputasi dengan konsep reaktivitas.
3. Melatih mahasiswa membedakan data numerik dan interpretasi kimia.
4. Menghindari kesimpulan yang terlalu sederhana atau terlalu mutlak.
5. Membiasakan mahasiswa menulis argumen ilmiah berbasis bukti.
6. Mendorong mahasiswa membandingkan molekul model secara kritis.

Dalam konteks pembelajaran, pertanyaan diskusi juga melatih mahasiswa menggunakan bahasa ilmiah. Mahasiswa harus menghindari kalimat seperti “molekul ini pasti paling reaktif” tanpa konteks. Sebaliknya, mahasiswa perlu menggunakan rumusan seperti “berdasarkan data praktikum ini”, “secara relatif”, “dapat dikaitkan dengan”, “menunjukkan kecenderungan”, dan “perlu didukung oleh visualisasi orbital”.

Dengan demikian, pertanyaan diskusi bukan bagian tambahan, melainkan inti dari proses pembelajaran praktikum. Di sinilah mahasiswa menunjukkan apakah mereka benar-benar memahami hubungan antara perhitungan DFT, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul.

2. Pertanyaan 1: Apa Arti HOMO dalam Reaksi Kimia?

HOMO adalah singkatan dari **Highest Occupied Molecular Orbital**, yaitu orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Dalam konteks reaksi kimia, HOMO sering dikaitkan dengan kemampuan suatu molekul atau bagian molekul untuk **menyumbangkan elektron**. Karena HOMO merupakan orbital terisi yang paling tinggi energinya, elektron pada orbital ini relatif lebih mudah terlibat dalam interaksi dengan orbital kosong dari spesies lain.

Dalam teori orbital frontier, HOMO memiliki peran penting karena banyak reaksi kimia dapat dipahami sebagai interaksi antara orbital terisi dari satu spesies dan orbital kosong dari spesies lain. Jika suatu molekul bertindak sebagai donor elektron, maka orbital yang paling relevan biasanya adalah HOMO. Oleh karena itu, energi dan bentuk HOMO dapat memberikan informasi tentang kecenderungan molekul untuk berperan sebagai nukleofil, donor elektron, atau spesies yang relatif mudah teroksidasi.

Secara konseptual:

HOMO tinggi
 → elektron relatif lebih mudah didonasikan
 → kecenderungan donor elektron lebih kuat

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa HOMO bukan satu-satunya penentu reaktivitas. Reaksi kimia juga dipengaruhi oleh muatan, pelarut, hambatan sterik, orientasi orbital, keadaan transisi, suhu, katalis, dan mekanisme reaksi. Karena itu, pernyataan bahwa “molekul dengan HOMO tinggi pasti paling reaktif” tidak tepat. Pernyataan yang lebih ilmiah adalah bahwa HOMO tinggi **dapat menunjukkan kecenderungan donor elektron yang lebih besar dalam konteks reaksi tertentu**.

Contoh pada etilena dapat digunakan untuk menjelaskan makna HOMO. Etilena memiliki ikatan rangkap C=C dengan orbital π terisi. HOMO etilena dapat dikaitkan dengan orbital π tersebut. Dalam reaksi dengan elektrofil, elektron π pada ikatan rangkap dapat berperan sebagai donor elektron. Dengan demikian, HOMO membantu menjelaskan mengapa ikatan rangkap dapat terlibat dalam reaksi adisi elektrofilik.

Contoh analisis jawaban mahasiswa:

HOMO adalah orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Dalam reaksi kimia, HOMO dapat dipahami sebagai orbital donor elektron karena elektron pada orbital ini relatif lebih mudah berinteraksi dengan orbital kosong dari spesies lain. Pada etilena, HOMO berkaitan dengan orbital π ikatan C=C, sehingga elektron π dapat berperan sebagai donor dalam interaksi dengan elektrofil. Namun, peran

HOMO tetap harus ditafsirkan bersama bentuk orbital, mekanisme reaksi, dan kondisi lingkungan.

Jawaban seperti ini baik karena memuat definisi, makna reaktivitas, contoh, dan batas interpretasi.

3. HOMO, Nukleofilisitas, dan Donor Elektron

Dalam kimia organik, konsep HOMO sering dikaitkan dengan nukleofilisitas. Nukleofil adalah spesies yang menyumbangkan pasangan elektron kepada elektrofil. Karena HOMO adalah orbital terisi tertinggi, maka ia sering menjadi orbital yang berperan dalam donasi elektron.

Namun, hubungan antara HOMO dan nukleofilisitas harus dipahami secara hati-hati. Nukleofilisitas adalah konsep kinetik yang dipengaruhi oleh banyak faktor, termasuk pelarut, ukuran atom, polarisabilitas, muatan, sterik, dan pasangan reaksi. HOMO dapat membantu menjelaskan kecenderungan donor elektron, tetapi tidak selalu cukup untuk memprediksi laju reaksi.

Misalnya, molekul dengan HOMO relatif tinggi dapat memiliki kecenderungan donor elektron lebih besar. Akan tetapi, jika bagian molekul yang memiliki kontribusi HOMO besar terhalang secara sterik, reaksi dapat tetap berlangsung lambat. Sebaliknya, spesies dengan HOMO tidak terlalu tinggi dapat tetap reaktif jika mekanisme dan lingkungan mendukung.

Dalam Praktikum 4, mahasiswa tidak diminta memprediksi laju reaksi secara rinci. Mahasiswa hanya diminta memahami bahwa HOMO memberikan petunjuk tentang kemampuan donor elektron. Untuk memperkuat analisis, mahasiswa harus melihat visualisasi HOMO. Jika HOMO tersebar pada sistem π , maka sistem π tersebut dapat dibahas sebagai daerah donor elektron. Jika HOMO terlokalisasi pada gugus tertentu, maka gugus tersebut dapat menjadi bagian penting dalam interpretasi.

Dengan demikian, HOMO harus dipahami sebagai konsep penghubung antara struktur elektronik dan kecenderungan reaktivitas, bukan sebagai jawaban tunggal terhadap semua persoalan reaksi.

4. Pertanyaan 2: Apa Arti LUMO dalam Reaksi Kimia?

LUMO adalah singkatan dari **Lowest Unoccupied Molecular Orbital**, yaitu orbital molekul kosong dengan energi terendah. Dalam konteks reaksi kimia, LUMO sering dikaitkan dengan kemampuan suatu molekul atau bagian molekul untuk **menerima elektron**. Karena LUMO merupakan orbital kosong yang paling rendah energinya, orbital ini relatif paling mudah menerima donasi elektron dari orbital terisi spesies lain.

Dalam teori orbital frontier, LUMO berperan sebagai orbital akseptor. Jika suatu molekul bertindak sebagai elektrofil, maka orbital yang sering diperhatikan adalah LUMO. Semakin rendah

energi LUMO, semakin mudah secara relatif orbital tersebut menerima elektron, meskipun reaktivitas aktual tetap bergantung pada banyak faktor.

Secara konseptual:

LUMO rendah

→ lebih mudah menerima elektron

→ kecenderungan akseptor elektron lebih kuat

Contoh penting dalam Praktikum 4 adalah formaldehida. Formaldehida memiliki gugus karbonil $C=O$. LUMO formaldehida sering berkaitan dengan orbital antibonding π^* karbonil. Orbital π^* ini dapat menerima donasi elektron dari nukleofil. Oleh karena itu, formaldehida dapat digunakan sebagai model sederhana untuk memahami peran LUMO dalam reaksi adisi nukleofilik pada karbonil.

Jawaban diskusi yang baik dapat berbentuk:

LUMO adalah orbital molekul kosong dengan energi terendah. Dalam reaksi kimia, LUMO berperan sebagai orbital akseptor elektron karena dapat menerima donasi elektron dari HOMO spesies donor. Pada formaldehida, LUMO berkaitan dengan orbital π^* gugus karbonil yang dapat menerima elektron dari nukleofil. Oleh karena itu, analisis LUMO membantu menjelaskan sifat elektrofilik gugus karbonil. Namun, interpretasi LUMO harus didukung oleh visualisasi orbital dan tidak boleh dilepaskan dari mekanisme reaksi.

Jawaban tersebut kuat karena tidak hanya mendefinisikan LUMO, tetapi juga menghubungkannya dengan gugus karbonil, donor-akseptor elektron, dan batas interpretasi.

5. LUMO, Elektrofilitas, dan Akseptor Elektron

Dalam reaksi kimia, elektrofil adalah spesies yang menerima pasangan elektron. Karena LUMO adalah orbital kosong terendah, LUMO sering digunakan untuk memahami sifat elektrofilik suatu molekul. Jika LUMO suatu molekul relatif rendah, molekul tersebut dapat memiliki kecenderungan lebih besar untuk menerima elektron.

Namun, sebagaimana HOMO tidak identik sepenuhnya dengan nukleofilisitas, LUMO juga tidak identik sepenuhnya dengan elektrofilitas. Elektrofilitas dipengaruhi oleh muatan, polaritas, pelarut, struktur, orientasi orbital, dan mekanisme reaksi. Nilai LUMO hanya memberikan informasi elektronik global atau orbital tertentu yang perlu ditafsirkan bersama data lain.

Dalam Praktikum 4, indeks elektrofilitas sederhana dihitung dari elektronegativitas Mulliken dan hardness. Parameter ini membantu membaca kecenderungan global molekul menerima elektron. Namun, indeks elektrofilitas global belum menunjukkan lokasi serangan. Untuk mengetahui bagian molekul mana yang berperan sebagai pusat akseptor elektron, mahasiswa perlu melihat bentuk LUMO.

Contoh formaldehida memperlihatkan hal ini dengan jelas. Jika visualisasi LUMO menunjukkan kontribusi pada gugus karbonil, maka mahasiswa dapat menghubungkan nilai LUMO dengan sifat akseptor karbonil. Namun, jika hanya melihat angka tanpa visualisasi, mahasiswa tidak dapat menjelaskan secara meyakinkan mengapa karbon karbonil menjadi bagian penting dalam reaktivitas.

Dengan demikian, LUMO harus dipahami sebagai indikator akseptor elektron yang kuat secara konseptual, tetapi tetap memerlukan analisis struktur dan visualisasi orbital.

6. Interaksi HOMO-LUMO dalam Reaksi Kimia

Pertanyaan tentang HOMO dan LUMO sebenarnya saling berhubungan. Dalam banyak reaksi kimia, interaksi penting terjadi antara HOMO donor dan LUMO akseptor. Jika energi kedua orbital relatif sesuai dan tumpang tindih orbital memungkinkan, interaksi menjadi lebih efektif.

Secara sederhana:

HOMO donor + LUMO akseptor
 → interaksi orbital frontier
 → pembentukan atau perubahan ikatan

Dalam reaksi adisi nukleofilik pada formaldehida, HOMO nukleofil dapat berinteraksi dengan LUMO π^* karbonil formaldehida. Dalam reaksi alkena dengan elektrofil, HOMO π alkena dapat berinteraksi dengan orbital kosong elektrofil. Dalam sistem terkonjugasi, delokalisasi orbital dapat mengubah energi HOMO dan LUMO sehingga memengaruhi kecenderungan reaksi.

Namun, interaksi HOMO-LUMO juga bergantung pada simetri dan orientasi. Orbital yang energinya cocok belum tentu berinteraksi kuat jika bentuk dan fasenya tidak memungkinkan tumpang tindih yang efektif. Inilah alasan visualisasi orbital penting dalam praktikum. Mahasiswa tidak hanya harus melihat nilai energi, tetapi juga bentuk orbital.

Dengan demikian, diskusi tentang HOMO dan LUMO sebaiknya tidak dipisahkan secara kaku. HOMO menjelaskan sisi donor, LUMO menjelaskan sisi akseptor, sedangkan reaksi kimia sering melibatkan interaksi keduanya.

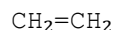
7. Pertanyaan 3: Mengapa Butadiena Memiliki Gap Lebih Kecil daripada Etilena?

Butadiena memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada etilena karena butadiena memiliki sistem π terkonjugasi yang lebih panjang. Etilena hanya memiliki satu ikatan rangkap $C=C$, sehingga sistem π -nya terbatas pada dua atom karbon. Butadiena, khususnya 1,3-butadiena,

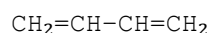
memiliki dua ikatan rangkap yang dipisahkan oleh satu ikatan tunggal, sehingga orbital p pada empat atom karbon dapat saling berinteraksi.

Struktur konseptualnya:

Etilena:



Butadiena:



Pada etilena, dua orbital p membentuk dua orbital molekul π : satu orbital bonding π dan satu orbital antibonding π^* . HOMO berkaitan dengan orbital π terisi, sedangkan LUMO berkaitan dengan orbital π^* kosong. Karena hanya ada dua orbital p yang berinteraksi, pemisahan energi antara π dan π^* relatif besar.

Pada butadiena, empat orbital p berinteraksi dan membentuk empat orbital π molekul. Karena jumlah orbital yang berinteraksi lebih banyak, tingkat energi orbital menjadi lebih rapat. Elektron π terdelokalisasi pada empat atom karbon. Akibatnya, pemisahan energi antara HOMO dan LUMO menjadi lebih kecil dibanding etilena.

Secara ringkas:

Etilena

- 2 orbital p
- 2 orbital π
- gap relatif besar

Butadiena

- 4 orbital p
- 4 orbital π
- tingkat energi lebih rapat
- gap relatif kecil

Jawaban diskusi yang baik:

Butadiena memiliki gap HOMO-LUMO lebih kecil daripada etilena karena butadiena memiliki sistem π terkonjugasi yang melibatkan empat atom karbon. Delokalisasi elektron π pada butadiena menyebabkan tingkat energi orbital menjadi lebih rapat dibanding etilena yang hanya memiliki satu ikatan π . Akibatnya, selisih energi antara HOMO dan LUMO pada butadiena menjadi lebih kecil. Gap yang lebih kecil ini menunjukkan bahwa konjugasi dapat memengaruhi stabilitas dan reaktivitas elektronik molekul.

Jawaban tersebut tepat karena menghubungkan gap dengan konjugasi, delokalisasi, dan tingkat energi orbital.

8. Konjugasi, Delokalisasi, dan Stabilitas Elektronik Butadiena

Konjugasi pada butadiena tidak hanya menurunkan gap HOMO-LUMO, tetapi juga memengaruhi stabilitas elektronik. Elektron π yang terdelokalisasi pada lebih banyak atom dapat menurunkan energi relatif sistem dibandingkan jika elektron sepenuhnya terlokalisasi pada dua ikatan rangkap terpisah. Dalam kimia organik, delokalisasi sering dikaitkan dengan stabilisasi.

Namun, mahasiswa harus membedakan dua hal: stabilisasi akibat delokalisasi dan reaktivitas akibat gap lebih kecil. Delokalisasi dapat menstabilkan molekul, tetapi gap yang lebih kecil juga dapat menunjukkan bahwa sistem lebih mudah mengalami interaksi elektronik tertentu. Dua hal ini tidak saling bertentangan, tetapi menunjukkan bahwa stabilitas dan reaktivitas adalah konsep yang memiliki banyak dimensi.

Butadiena dapat lebih stabil dibanding sistem diena terisolasi karena konjugasi, tetapi tetap memiliki karakter reaktivitas khas sebagai sistem π terkonjugasi. Dalam reaksi seperti Diels–Alder, misalnya, butadiena dapat berperan sebagai diena karena struktur orbital frontier-nya memungkinkan interaksi dengan dienofil. Praktikum ini tidak menghitung reaksi Diels–Alder, tetapi konsep gap dan orbital frontier membantu mahasiswa memahami mengapa sistem terkonjugasi memiliki karakter reaktivitas khusus.

Dengan demikian, pertanyaan tentang butadiena dan etilena tidak hanya melatih mahasiswa menghitung gap, tetapi juga melatih mereka memahami hubungan antara struktur π , delokalisasi, stabilitas, dan reaktivitas.

9. Pertanyaan 4: Bagaimana Gugus Nitro Memengaruhi Distribusi Elektron?

Gugus nitro $-\text{NO}_2$ merupakan gugus penarik elektron kuat. Dalam nitrobenzena, gugus nitro terikat pada cincin benzena dan memengaruhi distribusi elektron cincin melalui dua mekanisme utama: **efek induktif** dan **efek resonansi**.

Efek induktif terjadi karena atom-atom oksigen dalam gugus nitro sangat elektronegatif. Gugus nitro menarik kerapatan elektron melalui ikatan σ . Efek resonansi terjadi karena gugus nitro dapat berinteraksi dengan sistem π cincin aromatik dan menarik kerapatan elektron melalui delokalisasi π .

Secara konseptual:

- gugus nitro
- menarik elektron melalui efek induktif
- menarik elektron melalui efek resonansi
- mengubah distribusi elektron cincin benzena
- memengaruhi energi HOMO dan LUMO
- memengaruhi reaktivitas aromatik

Dalam analisis HOMO-LUMO, gugus nitro dapat menurunkan energi orbital tertentu, terutama orbital kosong yang memiliki kontribusi pada gugus nitro atau sistem aromatik yang terpengaruh olehnya. Jika LUMO nitrobenzena lebih rendah daripada LUMO benzena, hal ini dapat dikaitkan dengan sifat gugus nitro sebagai akseptor elektron. Jika visualisasi LUMO menunjukkan kontribusi signifikan pada gugus nitro, maka interpretasi ini menjadi lebih kuat.

Jawaban diskusi yang baik:

Gugus nitro memengaruhi distribusi elektron dengan menarik kerapatan elektron dari cincin benzena melalui efek induktif dan resonansi. Akibatnya, cincin aromatik pada nitrobenzena menjadi lebih miskin elektron dibanding benzena. Dalam analisis HOMO-LUMO, gugus nitro dapat menurunkan energi orbital kosong tertentu dan mengubah distribusi LUMO. Jika visualisasi LUMO menunjukkan kontribusi pada gugus nitro, hal ini mendukung peran gugus nitro sebagai bagian akseptor elektron dalam molekul.

Jawaban tersebut baik karena menggabungkan efek induktif, resonansi, distribusi elektron, HOMO-LUMO, dan visualisasi orbital.

10. Gugus Nitro sebagai Substituen Penarik Elektron dalam Sistem Aromatik

Dalam kimia aromatik, gugus nitro dikenal sebagai substituen penarik elektron dan deaktivator terhadap substitusi aromatik elektrofilik. Artinya, keberadaan gugus nitro menurunkan kerapatan elektron cincin sehingga cincin menjadi kurang reaktif terhadap elektrofil dibanding benzena. Selain itu, gugus nitro bersifat pengarah meta dalam substitusi aromatik elektrofilik karena distribusi kerapatan elektron dan bentuk struktur resonansi membuat posisi orto dan para relatif kurang menguntungkan untuk serangan elektrofil.

Dalam Praktikum 4, mahasiswa tidak diminta membahas mekanisme substitusi aromatik elektrofilik secara panjang. Namun, mereka harus memahami bahwa pengaruh gugus nitro terhadap distribusi elektron memiliki konsekuensi terhadap reaktivitas cincin aromatik. Perhitungan HOMO-LUMO dan visualisasi orbital dapat membantu memperlihatkan bahwa nitrobenzena bukan hanya benzena yang diberi tambahan gugus NO_2 secara geometris, tetapi sistem elektroniknya berubah secara nyata.

Perbandingan benzena dan nitrobenzena harus menjadi bagian penting jawaban. Benzena adalah sistem aromatik tanpa substituen. Nitrobenzena adalah sistem aromatik dengan substituen penarik elektron. Jika data menunjukkan perubahan energi HOMO, LUMO, gap, elektronegativitas Mulliken, atau elektrofilisitas, mahasiswa harus menghubungkannya dengan pengaruh gugus nitro.

Contoh jawaban analitis:

Dibanding benzena, nitrobenzena memiliki gugus NO_2 yang menarik kerapatan elektron dari cincin. Pengaruh ini dapat menurunkan kemampuan cincin bertindak sebagai donor elektron dan mengubah energi orbital frontier. Oleh karena itu,

distribusi HOMO dan LUMO pada nitrobenzena perlu dibandingkan dengan benzena untuk melihat bagaimana substituen mengubah struktur elektronik molekul.

Jawaban seperti ini menunjukkan kemampuan membandingkan molekul model secara kritis.

11. Cara Menjawab Pertanyaan Diskusi secara Ilmiah

Agar jawaban diskusi kuat, mahasiswa dapat menggunakan pola berikut:

1. **Mulai dengan definisi singkat.**
2. **Hubungkan dengan teori.**
3. **Gunakan data praktikum.**
4. **Berikan contoh molekul model.**
5. **Sebutkan batas interpretasi.**

Contoh pola jawaban untuk pertanyaan HOMO:

HOMO adalah orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Dalam teori orbital frontier, HOMO berkaitan dengan kemampuan donor elektron. Pada molekul etilena, HOMO berhubungan dengan orbital π ikatan C=C. Karena orbital ini terisi, elektron pada orbital tersebut dapat berinteraksi dengan orbital kosong dari elektrofil. Namun, kemampuan reaksi tidak hanya ditentukan oleh HOMO, tetapi juga oleh bentuk orbital, mekanisme, dan kondisi reaksi.

Contoh pola jawaban untuk pertanyaan LUMO:

LUMO adalah orbital molekul kosong dengan energi terendah. Dalam reaksi kimia, LUMO berperan sebagai orbital akseptor elektron. Pada formaldehida, LUMO dapat berkaitan dengan orbital π^* gugus karbonil yang menerima donasi elektron dari nukleofil. Namun, interpretasi LUMO harus didukung oleh visualisasi orbital dan analisis struktur.

Pola jawaban seperti ini lebih baik daripada jawaban satu kalimat karena menunjukkan hubungan antara konsep, data, dan konteks.

12. Kriteria Jawaban Diskusi yang Baik

Jawaban diskusi dianggap baik jika memenuhi beberapa kriteria berikut:

Kriteria	Penjelasan
Definisi jelas	Istilah HOMO, LUMO, gap, konjugasi, dan substituen dijelaskan dengan benar
Berbasis teori	Jawaban mengacu pada teori orbital frontier, delokalisasi, atau efek substituen
Berbasis data	Jawaban menghubungkan teori dengan data praktikum

Menggunakan contoh	Jawaban menyebut etilena, butadiena, formaldehida, benzena, atau nitrobenzena
Tidak mutlak	Jawaban tidak menyatakan reaktivitas secara berlebihan
Kritis	Jawaban menyebut batas interpretasi
Terstruktur	Jawaban memiliki alur definisi, penjelasan, contoh, dan kesimpulan
Kontekstual	Jawaban sesuai dengan Praktikum 4
Memakai istilah tepat	Donor, akseptor, orbital π , π^* , konjugasi, substituen digunakan dengan benar
Didukung visualisasi	Jika relevan, jawaban menyebut pentingnya visualisasi orbital

Kriteria ini dapat digunakan dosen untuk menilai jawaban mahasiswa. Mahasiswa juga dapat menggunakannya sebagai panduan menulis laporan.

13. Contoh Jawaban Ringkas yang Kurang Tepat dan Perbaikannya

a. Pertanyaan HOMO

Jawaban kurang tepat:

HOMO adalah orbital paling tinggi dan menentukan reaktivitas.

Kelemahannya adalah terlalu singkat dan terlalu mutlak.

Perbaikan:

HOMO adalah orbital molekul terisi dengan energi tertinggi. Dalam reaksi kimia, HOMO sering berperan sebagai orbital donor elektron. Molekul atau bagian molekul dengan kontribusi HOMO besar dapat berinteraksi dengan orbital kosong dari spesies akseptor. Namun, reaktivitas tidak hanya ditentukan oleh HOMO, tetapi juga oleh bentuk orbital, mekanisme reaksi, dan kondisi lingkungan.

b. Pertanyaan LUMO

Jawaban kurang tepat:

LUMO adalah orbital kosong dan tempat elektron masuk.

Perbaikan:

LUMO adalah orbital molekul kosong dengan energi terendah. Dalam reaksi kimia, LUMO sering berperan sebagai orbital akseptor elektron. Pada formaldehida, LUMO yang berkaitan dengan orbital π^* karbonil dapat menerima donasi elektron dari nukleofil. Oleh karena itu, LUMO membantu menjelaskan karakter elektrofilik suatu molekul atau gugus fungsi.

c. Pertanyaan Butadiena dan Etilena

Jawaban kurang tepat:

Butadiena gap-nya lebih kecil karena molekulnya lebih besar.

Perbaikan:

Butadiena memiliki gap lebih kecil daripada etilena karena butadiena memiliki sistem π terkonjugasi. Empat orbital p pada butadiena saling berinteraksi sehingga elektron π terdelokalisasi pada empat atom karbon. Delokalisasi ini membuat tingkat energi orbital lebih rapat dan memperkecil selisih antara HOMO dan LUMO.

d. Pertanyaan Gugus Nitro

Jawaban kurang tepat:

Gugus nitro menarik elektron sehingga nitrobenzena berubah.

Perbaikan:

Gugus nitro menarik kerapatan elektron dari cincin benzena melalui efek induktif dan resonansi. Akibatnya, distribusi elektron pada nitrobenzena berbeda dari benzena. Dalam analisis HOMO-LUMO, gugus nitro dapat menurunkan energi orbital kosong tertentu dan memengaruhi distribusi LUMO. Hal ini menjelaskan mengapa nitrobenzena memiliki karakter elektronik yang berbeda dari benzena.

14. Implikasi Diskusi terhadap Pemahaman Reaktivitas

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 4 membantu mahasiswa memahami bahwa reaktivitas molekul bukan konsep yang berdiri sendiri. Reaktivitas muncul dari hubungan antara struktur, elektron, energi, orbital, dan lingkungan. HOMO menunjukkan sisi donor elektron. LUMO menunjukkan sisi akseptor elektron. Gap HOMO-LUMO memberikan indikator global stabilitas dan reaktivitas elektronik. Konjugasi memengaruhi delokalisasi dan memperkecil gap. Substituen seperti nitro mengubah distribusi elektron dan energi orbital.

Dengan menjawab pertanyaan diskusi, mahasiswa diharapkan mampu mengembangkan cara berpikir berikut:

struktur molekul
 → menentukan distribusi elektron
 → membentuk orbital HOMO-LUMO
 → memengaruhi gap dan parameter reaktivitas
 → memberi petunjuk tentang kecenderungan reaksi

Cara berpikir ini sangat penting dalam kimia komputasi. Mahasiswa tidak hanya menghafal istilah HOMO dan LUMO, tetapi menggunakannya untuk menjelaskan fenomena kimia.

15. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi

Secara pedagogis, subbab ini memiliki beberapa implikasi penting.

Pertama, mahasiswa belajar bahwa praktikum komputasi harus berakhir dengan pemahaman, bukan hanya output. File CSV, grafik, dan diagram energi orbital tidak cukup jika mahasiswa tidak dapat menjelaskan maknanya.

Kedua, mahasiswa belajar menulis jawaban ilmiah. Jawaban diskusi harus memiliki struktur, menggunakan istilah tepat, dan menghindari klaim berlebihan.

Ketiga, mahasiswa belajar berpikir komparatif. Etilena tidak hanya dianalisis sebagai etilena, tetapi dibandingkan dengan butadiena. Benzena tidak hanya dianalisis sebagai benzena, tetapi dibandingkan dengan nitrobenzena.

Keempat, mahasiswa belajar menggabungkan kimia organik dan kimia kuantum. Konsep seperti ikatan rangkap, karbonil, aromaticitas, dan substituen tidak lagi hanya dijelaskan melalui struktur Lewis, tetapi juga melalui orbital dan energi.

Kelima, mahasiswa belajar bahwa model komputasi memiliki batas. Hasil DFT, HOMO-LUMO, dan parameter reaktivitas global harus digunakan secara kritis.

16. Rangkuman Subbab Pertanyaan Diskusi

Subbab 7.10 menegaskan bahwa pertanyaan diskusi merupakan bagian penting dari Praktikum 4. Pertanyaan tentang HOMO membantu mahasiswa memahami donor elektron. Pertanyaan tentang LUMO membantu mahasiswa memahami akseptor elektron. Pertanyaan tentang butadiena dan etilena membantu mahasiswa memahami pengaruh konjugasi terhadap gap HOMO-LUMO. Pertanyaan tentang gugus nitro membantu mahasiswa memahami pengaruh substituen penarik elektron terhadap distribusi elektron.

Keempat pertanyaan tersebut saling berkaitan. HOMO dan LUMO membentuk dasar teori orbital frontier. Gap HOMO-LUMO membantu membaca stabilitas dan reaktivitas elektronik. Konjugasi menjelaskan mengapa butadiena berbeda dari etilena. Gugus nitro menjelaskan bagaimana substituen mengubah struktur elektronik benzena. Dengan demikian, pertanyaan diskusi mengikat seluruh isi Praktikum 4 menjadi pemahaman yang utuh.

Penutup Bab 7

Bab 7 telah membahas Praktikum 4 tentang **DFT, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul**. Bab ini menandai perluasan penting dari praktikum sebelumnya. Jika Bab 6 memusatkan perhatian pada Hartree–Fock, basis set, energi total, dan biaya komputasi, maka Bab 7 membawa mahasiswa menuju pemahaman yang lebih interpretatif: bagaimana struktur elektronik molekul dapat

digunakan untuk membaca kecenderungan donor elektron, akseptor elektron, stabilitas elektronik, konjugasi, dan pengaruh substituen.

Gagasan utama Bab 7 adalah bahwa reaktivitas molekul dapat dipelajari melalui data struktur elektronik. Dalam kimia organik klasik, reaktivitas sering dijelaskan melalui struktur Lewis, gugus fungsi, resonansi, efek induktif, dan polaritas. Penjelasan tersebut tetap penting. Namun, melalui kimia komputasi, mahasiswa dapat memperkuat penalaran tersebut dengan data HOMO, LUMO, gap HOMO-LUMO, visualisasi orbital, serta parameter reaktivitas global seperti hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilisitas.

Bab ini juga menegaskan peran **Density Functional Theory** sebagai metode penting dalam kimia komputasi modern. DFT memungkinkan mahasiswa menghitung struktur elektronik molekul dengan biaya komputasi yang relatif lebih terjangkau dibanding banyak metode pasca-Hartree–Fock. Meskipun demikian, Bab 7 juga menekankan bahwa DFT bukan metode yang bebas keterbatasan. Hasil DFT selalu bergantung pada fungsional, basis set, geometri, pengaturan perhitungan, dan kualitas output. Oleh karena itu, mahasiswa harus menulis metode secara lengkap dan menafsirkan hasil secara kritis.

Konsep **HOMO** dan **LUMO** menjadi inti pembelajaran Bab 7. HOMO dipahami sebagai orbital molekul terisi dengan energi tertinggi yang sering berkaitan dengan kecenderungan donor elektron. LUMO dipahami sebagai orbital kosong dengan energi terendah yang sering berkaitan dengan kecenderungan akseptor elektron. Interaksi antara HOMO donor dan LUMO akseptor menjadi dasar penting dalam teori orbital frontier. Namun, mahasiswa juga harus memahami bahwa HOMO-LUMO bukan satu-satunya penentu reaktivitas. Reaksi kimia juga dipengaruhi oleh mekanisme, orientasi orbital, pelarut, muatan, sterik, suhu, katalis, dan faktor lingkungan lainnya.

Molekul model dalam Bab 7 dipilih secara bertahap dan pedagogis. **Etilena** memperkenalkan sistem π sederhana. **Butadiena** menunjukkan pengaruh konjugasi terhadap penurunan gap HOMO-LUMO. **Benzena** memperlihatkan delokalisasi aromatik. **Formaldehida** memperkenalkan gugus karbonil sebagai model akseptor elektron melalui orbital π^* . **Nitrobenzena** memperlihatkan pengaruh substituen penarik elektron terhadap distribusi orbital pada cincin aromatik. Dengan kelima molekul tersebut, mahasiswa belajar membaca hubungan antara struktur, orbital, energi, dan reaktivitas.

Bab 7 juga memperlihatkan pentingnya integrasi software. ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol, dan Python memiliki peran yang saling melengkapi. ChemCompute memudahkan akses perhitungan berbasis web. ORCA, GAMESS, dan Gaussian berperan sebagai mesin perhitungan struktur elektronik. Avogadro membantu membangun struktur molekul. Gabedit, Molden, dan Jmol membantu visualisasi orbital. Python digunakan untuk analisis data HOMO-LUMO, perhitungan parameter reaktivitas, pembuatan grafik, diagram energi orbital, dan penyimpanan CSV.

Dengan demikian, Bab 7 menegaskan bahwa praktikum kimia kuantum modern bukan hanya kegiatan menjalankan software. Praktikum ini merupakan proses ilmiah yang terdiri atas penyusunan struktur molekul, pemilihan metode, perhitungan elektronik, validasi output,

pengambilan data orbital, visualisasi HOMO-LUMO, analisis numerik, dan penulisan interpretasi kimia. Mahasiswa dilatih agar tidak hanya menjadi pengguna software, tetapi menjadi pembaca kritis terhadap data komputasi.

Rangkuman Bab 7

1. **Bab 7 membahas Praktikum 4 tentang DFT, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul.**
2. **DFT** digunakan sebagai metode struktur elektronik yang berbasis kerapatan elektron dan banyak dipakai dalam kimia komputasi modern.
3. **HOMO** adalah orbital molekul terisi dengan energi tertinggi dan sering dikaitkan dengan kecenderungan donor elektron.
4. **LUMO** adalah orbital molekul kosong dengan energi terendah dan sering dikaitkan dengan kecenderungan akseptor elektron.
5. **Gap HOMO-LUMO** dihitung dari selisih energi LUMO dan HOMO, serta digunakan sebagai indikator global stabilitas dan reaktivitas elektronik.
6. Molekul dengan **gap besar** cenderung lebih stabil secara elektronik, sedangkan molekul dengan **gap kecil** cenderung lebih mudah mengalami perubahan distribusi elektron.
7. **Etilena** digunakan sebagai model sistem π sederhana.
8. **Butadiena** digunakan untuk menunjukkan pengaruh konjugasi terhadap penurunan gap HOMO-LUMO.
9. **Benzena** digunakan untuk memahami delokalisasi π aromatik.
10. **Formaldehida** digunakan sebagai model gugus karbonil dengan LUMO π^* sebagai akseptor elektron.
11. **Nitrobenzena** digunakan untuk memahami pengaruh gugus nitro sebagai substituen penarik elektron terhadap distribusi orbital.
12. Software yang digunakan meliputi **ChemCompute, ORCA, GAMESS, Gaussian, Avogadro, Gabedit, Molden, Jmol, dan Python.**
13. Jalur ChemCompute digunakan untuk menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris, mengunduh output, dan mengambil energi HOMO-LUMO.
14. Jalur Python mandiri digunakan untuk menghitung gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, indeks elektrofilitas, grafik gap, diagram orbital, dan CSV hasil analisis.
15. Analisis HOMO-LUMO harus dilakukan secara hati-hati karena parameter tersebut bersifat indikator global, bukan penentu tunggal seluruh reaktivitas molekul.

Sintesis Gagasan Utama Bab 7

Bab 7 memperlihatkan bahwa struktur elektronik dapat menjadi jembatan antara teori kimia kuantum dan reaktivitas kimia. Dalam kimia kuantum, orbital molekul adalah representasi matematis keadaan elektron. Dalam kimia organik, reaktivitas sering dijelaskan melalui donor

elektron, akseptor elektron, gugus fungsi, konjugasi, dan substituen. Praktikum 4 menghubungkan dua dunia tersebut melalui analisis HOMO-LUMO.

Etilena dan butadiena memperlihatkan bahwa perluasan sistem π mengubah struktur orbital. Butadiena memiliki sistem terkonjugasi yang membuat orbital π lebih terdelokalisasi dan tingkat energi orbital menjadi lebih rapat. Hal ini menjelaskan mengapa gap HOMO-LUMO butadiena dapat lebih kecil daripada etilena. Dengan demikian, konsep konjugasi yang semula diajarkan secara kualitatif dapat diperkuat melalui data komputasi.

Benzena dan nitrobenzena memperlihatkan pengaruh substituen terhadap struktur elektronik. Benzena menjadi acuan sistem aromatik tanpa substituen, sedangkan nitrobenzena memperlihatkan bagaimana gugus nitro menarik kerapatan elektron dan mengubah distribusi orbital. Perbandingan ini membantu mahasiswa memahami bahwa substituen tidak hanya mengubah struktur molekul secara geometri, tetapi juga mengubah sifat elektroniknya.

Formaldehida memperlihatkan hubungan antara gugus fungsi dan orbital akseptor. LUMO formaldehida yang berkaitan dengan orbital π^* karbonil membantu menjelaskan mengapa gugus karbonil dapat menerima donasi elektron dari nukleofil. Dengan demikian, analisis LUMO memperkuat pemahaman tentang reaktivitas karbonil.

Secara keseluruhan, Bab 7 mengajarkan bahwa data komputasi harus dibaca sebagai model. HOMO, LUMO, gap, hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan elektrofilitas memberikan informasi penting, tetapi tidak boleh ditafsirkan secara mutlak. Analisis yang baik harus menghubungkan angka, bentuk orbital, struktur molekul, teori kimia, dan batas metode.

Implikasi Keilmuan Bab 7

Bab 7 memiliki beberapa implikasi keilmuan penting.

Pertama, bab ini memperkuat pemahaman bahwa reaktivitas molekul memiliki dasar struktur elektronik. Donor elektron dan akseptor elektron tidak hanya dapat dijelaskan melalui struktur Lewis, tetapi juga melalui HOMO dan LUMO.

Kedua, bab ini menunjukkan bahwa konjugasi memiliki konsekuensi kuantitatif terhadap energi orbital. Sistem π yang lebih terdelokalisasi dapat memperkecil gap HOMO-LUMO dan memengaruhi stabilitas serta reaktivitas elektronik.

Ketiga, bab ini menjelaskan bahwa substituen dapat mengubah distribusi elektron secara signifikan. Gugus nitro pada nitrobenzena menjadi contoh bagaimana substituen penarik elektron memengaruhi energi dan bentuk orbital frontier.

Keempat, bab ini memperkenalkan DFT konseptual secara sederhana melalui parameter hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilitas. Parameter ini membantu mahasiswa membaca reaktivitas global molekul secara lebih sistematis.

Kelima, bab ini menegaskan bahwa interpretasi komputasi harus kritis. Hasil DFT, HOMO-LUMO, dan parameter reaktivitas bergantung pada metode, fungsional, basis set, geometri, dan validitas output.

Implikasi Praktis Bab 7

Secara praktis, Bab 7 membekali mahasiswa dengan kemampuan untuk:

1. Menjalankan perhitungan DFT atau semiempiris pada molekul organik sederhana.
2. Mengambil energi HOMO dan LUMO dari output perhitungan.
3. Memvisualisasikan HOMO dan LUMO menggunakan software visualisasi.
4. Menghitung gap HOMO-LUMO secara benar.
5. Menghitung hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan indeks elektrofilisitas.
6. Membuat grafik perbandingan gap antarmolekul.
7. Membuat diagram tingkat energi orbital.
8. Menyimpan hasil analisis dalam file CSV.
9. Menulis analisis yang menghubungkan data komputasi dengan konsep kimia.
10. Menghindari klaim reaktivitas yang terlalu mutlak.

Keterampilan ini penting karena analisis HOMO-LUMO banyak digunakan dalam laporan kimia komputasi, studi reaktivitas molekul, kajian material organik, desain molekul, kimia obat, dan penelitian berbasis struktur elektronik.

Keterbatasan Pembahasan Bab 7

Bab 7 sengaja membatasi analisis pada tingkat yang sesuai untuk praktikum dasar. Beberapa keterbatasan perlu disebutkan agar mahasiswa memahami ruang lingkup pembelajaran.

Pertama, analisis HOMO-LUMO dalam bab ini bersifat global dan kualitatif. Untuk menentukan lokasi reaksi secara lebih rinci, diperlukan analisis tambahan seperti muatan atomik, fungsi Fukui, peta potensial elektrostatik, atau analisis keadaan transisi.

Kedua, energi orbital dari DFT, khususnya orbital Kohn–Sham, harus ditafsirkan hati-hati. Energi HOMO dan LUMO sering digunakan secara praktis, tetapi tidak semua energi orbital Kohn–Sham dapat dipahami sebagai observabel langsung.

Ketiga, parameter reaktivitas seperti hardness, softness, elektronegativitas Mulliken, dan elektrofilisitas sangat bergantung pada energi HOMO dan LUMO yang digunakan. Jika data awal berbeda karena metode, fungsional, basis set, atau geometri berbeda, maka nilai parameter juga berubah.

Keempat, reaktivitas aktual tidak hanya ditentukan oleh gap HOMO-LUMO. Mekanisme reaksi, pelarut, suhu, katalis, orientasi orbital, hambatan sterik, dan energi keadaan transisi tetap berperan penting.

Kelima, molekul model dalam Bab 7 dipilih untuk tujuan pedagogis. Etilena, butadiena, benzena, formaldehida, dan nitrobenzena cukup baik untuk memperkenalkan konsep, tetapi belum mewakili seluruh keragaman reaktivitas molekul organik.

Dengan memahami keterbatasan tersebut, mahasiswa diharapkan tidak menggunakan hasil praktikum secara berlebihan. Sikap ilmiah yang benar bukan hanya mampu membaca hasil, tetapi juga mampu menyebut batas hasil tersebut.

Arah Menuju Bab Berikutnya

Setelah Bab 7 membahas DFT, HOMO-LUMO, dan reaktivitas molekul, bab berikutnya dapat diarahkan pada analisis sifat molekul lain yang lebih spesifik. Jika Bab 7 menekankan struktur elektronik frontier, maka bab berikutnya dapat memperluas pembahasan menuju sifat molekul seperti momen dipol, distribusi muatan, peta potensial elektrostatik, frekuensi vibrasi, spektrum IR, atau sifat spektroskopi lain sesuai susunan buku.

Dengan bekal Bab 7, mahasiswa telah memiliki kemampuan untuk membaca output struktur elektronik, menghubungkan energi orbital dengan reaktivitas, menggunakan Python untuk analisis data, dan menulis interpretasi berbasis teori. Kemampuan ini menjadi fondasi penting untuk praktikum kimia kuantum lanjutan yang lebih menuntut ketelitian metodologis dan kedalaman interpretasi.

Daftar Pustaka Bab 7

Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular Quantum Mechanics* (5th ed.). Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Foresman, J. B., & Frisch, A. E. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Fukui, K. (1982). Role of frontier orbitals in chemical reactions. *Science*, 218(4574), 747–754.

Geerlings, P., De Proft, F., & Langenaeker, W. (2003). Conceptual density functional theory. *Chemical Reviews*, 103(5), 1793–1874.

Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864–B871.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Koch, W., & Holthausen, M. C. (2001). *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* (2nd ed.). Wiley-VCH.

Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133–A1138.

Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Prentice Hall.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.

Lewars, E. G. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (3rd ed.). Springer.

Mulliken, R. S. (1934). A new electroaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities. *The Journal of Chemical Physics*, 2(11), 782–793.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.

Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system—Version 5.0. *WIREs Computational Molecular Science*, 12(5), e1606.

Parr, R. G., & Pearson, R. G. (1983). Absolute hardness: Companion parameter to absolute electronegativity. *Journal of the American Chemical Society*, 105(26), 7512–7516.

Parr, R. G., Szentpály, L. von, & Liu, S. (1999). Electrophilicity index. *Journal of the American Chemical Society*, 121(9), 1922–1924.

Parr, R. G., & Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press.

Pearson, R. G. (1963). Hard and soft acids and bases. *Journal of the American Chemical Society*, 85(22), 3533–3539.

Pearson, R. G. (1997). *Chemical Hardness: Applications from Molecules to Solids*. Wiley-VCH.

Ramachandran, K. I., Deepa, G., & Namboori, K. (2008). *Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications*. Springer.

Schmidt, M. W., Baldridge, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, J. H., Koseki, S., Matsunaga, N., Nguyen, K. A., Su, S. J., Windus, T. L., Dupuis, M., & Montgomery, J. A. (1993). General atomic and molecular electronic structure system. *Journal of Computational Chemistry*, 14(11), 1347–1363.

Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications.

Young, D. C. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. John Wiley & Sons.

BAB 8

PRAKTIKUM 5: SIMETRI MOLEKUL, KELOMPOK TITIK, DAN MOMEN DIPOL

Pengantar Bab 8

Bab 8 membahas Praktikum 5 tentang **simetri molekul, kelompok titik, dan momen dipol**. Bab ini memperluas pembelajaran kimia kuantum dari analisis energi dan orbital menuju analisis bentuk, keseimbangan geometri, arah vektor, polaritas, dan konsekuensi simetri terhadap sifat molekul. Jika Bab 7 menekankan hubungan antara HOMO-LUMO dan reaktivitas molekul, maka Bab 8 menekankan hubungan antara **struktur tiga dimensi molekul** dan **sifat fisik-kimia** yang muncul akibat distribusi atom serta distribusi muatan dalam ruang.

Simetri merupakan salah satu konsep paling mendasar dalam kimia kuantum, spektroskopi, kristalografi, kimia anorganik, kimia fisik, dan kimia material. Banyak sifat molekul dapat dipahami lebih sederhana jika molekul dianalisis berdasarkan unsur simetri dan kelompok titiknya. Molekul yang tampak rumit dapat memiliki pola simetri tertentu. Sebaliknya, molekul yang tampak sederhana dapat menunjukkan sifat penting karena simetrinya rendah. Oleh sebab itu, kemampuan mengenali simetri bukan hanya kemampuan menggambar bentuk molekul, tetapi kemampuan membaca hubungan antara geometri, vektor dipol, orbital, vibrasi, spektrum, dan reaktivitas.

Dalam literatur kimia fisik dan kimia anorganik, seperti karya Cotton tentang aplikasi teori grup dalam kimia, Bishop tentang group theory and chemistry, Carter tentang molecular symmetry and group theory, serta Atkins dan Friedman tentang mekanika kuantum molekul, simetri diposisikan sebagai bahasa formal untuk menyederhanakan persoalan molekul. Simetri membantu menentukan apakah suatu molekul polar atau nonpolar, apakah suatu mode vibrasi aktif IR atau Raman, bagaimana orbital dapat diklasifikasikan, serta bagaimana transisi elektronik dapat dianalisis. Dengan demikian, Bab 8 berfungsi sebagai pintu masuk menuju penggunaan teori grup secara praktis dalam kimia.

Praktikum 5 tidak dimaksudkan untuk membahas teori grup secara matematis penuh. Mahasiswa tidak diminta menurunkan tabel karakter secara lengkap atau membuktikan seluruh sifat representasi grup. Fokus praktikum ini lebih terarah: mahasiswa mengenali unsur simetri, menentukan kelompok titik secara manual dan berbantuan software, menghitung atau membaca momen dipol, lalu menghubungkan simetri molekul dengan polaritas. Pendekatan ini sesuai dengan tujuan buku praktikum, yaitu membangun keterampilan konseptual dan komputasional secara bertahap.

Molekul model yang digunakan dalam Bab 8 adalah **H₂O, NH₃, BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena**. Molekul-molekul ini dipilih karena mewakili variasi bentuk dan simetri yang jelas. H₂O mewakili molekul bengkok dan polar. NH₃ mewakili molekul piramidal trigonal dan polar. BF₃

mewakili molekul trigonal planar simetris dan nonpolar. CH_4 mewakili molekul tetrahedral sangat simetris dan nonpolar. CO_2 mewakili molekul linear simetris dan nonpolar. C_2H_4 mewakili molekul planar dengan unsur simetri tertentu. Benzena mewakili molekul aromatik planar dengan simetri tinggi. Dengan membandingkan molekul-molekul ini, mahasiswa dapat memahami bahwa polaritas tidak hanya ditentukan oleh jenis ikatan, tetapi oleh **resultan vektor momen dipol** yang sangat dipengaruhi oleh simetri.

Bab ini juga memperkenalkan penggunaan beberapa software, yaitu **ChemCompute, Avogadro, Jmol, symmetry tools, ORCA, Gaussian, dan Python**. ChemCompute digunakan untuk menjalankan optimasi geometri dan memperoleh momen dipol melalui paket yang tersedia. Avogadro dan Jmol digunakan untuk membangun serta memvisualisasikan struktur. Symmetry tools digunakan untuk membantu identifikasi unsur simetri dan kelompok titik. ORCA dan Gaussian dapat digunakan untuk perhitungan struktur elektronik dan momen dipol. Python digunakan untuk jalur mandiri, yaitu menghitung pusat massa, memperkirakan vektor dipol dari muatan parsial, menentukan polar atau nonpolar berdasarkan besar momen dipol, memvisualisasikan vektor dipol, dan menyusun tabel klasifikasi kelompok titik berdasarkan data mahasiswa.

Dengan demikian, Bab 8 menghubungkan tiga kemampuan penting: **kemampuan geometri, kemampuan konseptual, dan kemampuan komputasional**. Kemampuan geometri diperlukan untuk melihat bentuk molekul dalam ruang. Kemampuan konseptual diperlukan untuk memahami unsur simetri, kelompok titik, polaritas, dan aktivitas optik. Kemampuan komputasional diperlukan untuk menghitung, memvisualisasikan, dan menyimpan data secara reproduibel. Ketiganya harus berjalan bersama agar mahasiswa tidak hanya menghafal bahwa H_2O polar dan CO_2 nonpolar, tetapi mampu menjelaskan **mengapa** keduanya berbeda.

8.1 Tujuan Praktikum

Tujuan utama Praktikum 5 adalah agar mahasiswa mampu **mengidentifikasi unsur simetri, menentukan kelompok titik, dan menghubungkan simetri molekul dengan momen dipol**. Tujuan ini tampak sederhana, tetapi memiliki kedalaman konseptual yang besar. Untuk mencapainya, mahasiswa harus memahami bahwa molekul bukan hanya kumpulan atom yang saling berikatan, melainkan struktur ruang yang memiliki pola tertentu. Pola tersebut dapat dianalisis melalui operasi simetri dan unsur simetri. Dari pola simetri inilah polaritas, momen dipol, aktivitas spektroskopi, dan beberapa sifat molekul lain dapat dipahami secara lebih sistematis.

Dalam Praktikum 5, mahasiswa diharapkan tidak sekadar menjawab bahwa suatu molekul “polar” atau “nonpolar”. Mahasiswa harus mampu menelusuri alasan di baliknya. Misalnya, H_2O memiliki ikatan O–H yang polar dan bentuk molekul bengkok, sehingga resultan vektor dipolnya tidak saling meniadakan. Sebaliknya, CO_2 memiliki dua ikatan C=O yang polar, tetapi bentuknya linear dan simetris, sehingga vektor dipol kedua ikatan saling meniadakan. Perbandingan ini menunjukkan bahwa polaritas molekul bukan hanya ditentukan oleh polaritas ikatan, tetapi oleh geometri dan simetri molekul.

Praktikum ini juga bertujuan membangun kebiasaan berpikir vektorial. Momen dipol adalah besaran vektor, bukan sekadar angka. Ia memiliki besar dan arah. Oleh karena itu, mahasiswa harus belajar melihat arah momen dipol ikatan, menjumlahkannya secara konseptual, dan menentukan apakah hasilnya nol atau tidak. Dalam molekul yang sangat simetris, vektor-vektor dipol dapat saling meniadakan. Dalam molekul yang kurang simetris, resultan dipol dapat tersisa dan menghasilkan molekul polar.

1. Memahami Simetri Molekul sebagai Dasar Analisis Struktur

Tujuan pertama Praktikum 5 adalah agar mahasiswa memahami bahwa **simetri molekul** adalah keteraturan geometri molekul terhadap operasi tertentu. Operasi simetri dapat berupa rotasi, refleksi, inversi, atau kombinasi rotasi-refleksi. Jika setelah operasi tersebut molekul tampak tidak berubah, maka molekul memiliki simetri terkait operasi itu.

Dalam pembelajaran kimia dasar, bentuk molekul sering dijelaskan melalui teori VSEPR, misalnya linear, bengkok, trigonal planar, piramidal trigonal, tetrahedral, dan planar. Dalam Praktikum 5, bentuk-bentuk tersebut dinaikkan tingkat analisisnya melalui bahasa simetri. Molekul tidak hanya disebut “bengkok” atau “linear”, tetapi dianalisis berdasarkan unsur simetri dan kelompok titiknya.

Contoh sederhana:

Molekul	Bentuk Umum	Ciri Simetri Awal
H ₂ O	Bengkok	Memiliki bidang simetri, tetapi tidak linear
NH ₃	Piramidal trigonal	Memiliki sumbu rotasi C ₃
BF ₃	Trigonal planar	Memiliki simetri tinggi dalam bidang
CH ₄	Tetrahedral	Memiliki simetri sangat tinggi
CO ₂	Linear	Memiliki simetri linear dan pusat simetri
C ₂ H ₄	Planar	Memiliki beberapa unsur simetri
Benzena	Planar aromatik	Memiliki simetri sangat tinggi

Dengan memahami simetri molekul, mahasiswa dapat melihat bahwa bentuk molekul bukan sekadar hasil visual, tetapi memiliki konsekuensi terhadap sifat molekul. Molekul yang bentuknya simetris dapat memiliki momen dipol nol meskipun memiliki ikatan polar. Sebaliknya, molekul dengan simetri lebih rendah dapat memiliki momen dipol tidak nol.

2. Mengidentifikasi Unsur Simetri Molekul

Tujuan kedua adalah agar mahasiswa mampu mengidentifikasi **unsur simetri**. Unsur simetri adalah entitas geometris seperti sumbu, bidang, atau titik yang menjadi acuan operasi simetri. Dalam praktikum ini, unsur simetri yang penting meliputi:

1. **Sumbu rotasi proper** C_n
2. **Bidang cermin** σ
3. **Pusat inversi** i
4. **Sumbu rotasi tidak proper** S_n
5. **Identitas** E

Mahasiswa harus memahami perbedaan antara operasi simetri dan unsur simetri. Operasi simetri adalah tindakan yang dilakukan, misalnya memutar molekul 120° . Unsur simetri adalah acuan geometrisnya, misalnya sumbu C_3 . Perbedaan ini penting karena banyak mahasiswa menyamakan keduanya. Dalam teori grup molekul, keduanya berkaitan tetapi tidak identik.

Contoh pada NH_3 :

NH_3 memiliki sumbu C_3 .

Jika molekul diputar 120° terhadap sumbu tersebut, posisi tiga atom H saling bertukar, tetapi molekul secara keseluruhan tampak sama.

Contoh pada H_2O :

H_2O memiliki bidang simetri.

Jika molekul dicerminkan terhadap bidang tertentu, posisi atom-atomnya tetap menghasilkan struktur yang ekuivalen.

Contoh pada CO_2 :

CO_2 memiliki struktur linear $O=C=O$.

Karena kedua sisi molekul setara, molekul ini memiliki unsur simetri yang menyebabkan vektor dipol saling meniadakan.

Dengan latihan ini, mahasiswa tidak hanya melihat molekul sebagai gambar statis. Mereka belajar melakukan operasi mental terhadap molekul: memutar, mencerminkan, membalik, dan memeriksa apakah molekul tetap identik.

3. Menentukan Kelompok Titik Molekul

Tujuan ketiga adalah agar mahasiswa mampu menentukan **kelompok titik** molekul. Kelompok titik adalah kumpulan operasi simetri yang dimiliki molekul dan meninggalkan setidaknya satu titik tetap. Dalam kimia molekul, kelompok titik digunakan untuk mengklasifikasikan simetri molekul.

Beberapa kelompok titik yang relevan untuk molekul model dalam Praktikum 5 adalah:

Molekul	Kelompok Titik Umum	Catatan
H_2O	C_{2v}	Molekul bengkok dan polar

NH ₃	C _{3v}	Piramidal trigonal dan polar
BF ₃	D _{3h}	Trigonal planar dan nonpolar
CH ₄	T ^d	Tetrahedral dan nonpolar
CO ₂	D _{∞h}	Linear simetris dan nonpolar
C ₂ H ₄	D _{2h}	Planar dan simetris
Benzena	D _{6h}	Aromatik planar dengan simetri tinggi

Mahasiswa harus memahami bahwa penentuan kelompok titik bukan hafalan nama, tetapi hasil dari identifikasi unsur simetri. Misalnya, H₂O termasuk C_{2v} karena memiliki sumbu C₂ dan bidang simetri vertikal. NH₃ termasuk C_{3v} karena memiliki sumbu C₃ dan bidang simetri vertikal. BF₃ termasuk D_{3h} karena memiliki struktur trigonal planar dengan sumbu C₃, sumbu C₂, dan bidang horizontal. CH₄ termasuk T^d karena struktur tetrahedralnya memiliki banyak operasi simetri.

Tujuan pembelajaran ini penting karena kelompok titik menjadi bahasa ringkas untuk menyatakan sifat simetri molekul. Ketika seorang kimiawan menyebut bahwa H₂O memiliki kelompok titik C_{2v}, informasi tersebut langsung memberi petunjuk tentang bentuk, simetri, polaritas, dan kemungkinan aktivitas spektroskopinya.

4. Menghubungkan Simetri Molekul dengan Momen Dipol

Tujuan keempat adalah agar mahasiswa mampu menghubungkan simetri molekul dengan **momen dipol**. Momen dipol molekul muncul ketika terdapat pemisahan muatan positif dan negatif yang menghasilkan resultan vektor dipol tidak nol. Secara konseptual, momen dipol dapat dipahami sebagai ukuran polaritas molekul.

Momen dipol ikatan dapat saling meniadakan jika molekul memiliki simetri yang cukup tinggi. Contoh paling penting adalah CO₂. Ikatan C=O bersifat polar, tetapi molekul CO₂ linear dan simetris. Dua vektor dipol ikatan C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan, sehingga resultannya nol. Oleh karena itu, CO₂ bersifat nonpolar.

Sebaliknya, H₂O memiliki dua ikatan O–H yang polar, tetapi bentuk molekulnya bengkok. Karena vektor dipol O–H tidak tersusun berlawanan secara linear, resultannya tidak nol. Oleh karena itu, H₂O bersifat polar.

Perbandingan ini dapat diringkas:

Molekul	Bentuk	Ikatan Polar?	Resultan Dipol	Polaritas
H ₂ O	Bengkok	Ya	Tidak nol	Polar
CO ₂	Linear	Ya	Nol	Nonpolar
BF ₃	Trigonal planar	Ya	Nol	Nonpolar
NH ₃	Piramidal trigonal	Ya	Tidak nol	Polar
CH ₄	Tetrahedral simetris	Relatif simetris	Nol	Nonpolar

Tujuan praktikum ini bukan hanya membuat mahasiswa menghafal tabel tersebut, melainkan memahami mekanisme vektorialnya. Mahasiswa harus mampu menggambar arah vektor dipol dan menjelaskan mengapa vektor tersebut saling meniadakan atau tidak.

5. Memahami Polaritas sebagai Konsekuensi Geometri dan Distribusi Muatan

Tujuan kelima adalah agar mahasiswa memahami bahwa **polaritas molekul** merupakan konsekuensi dari dua faktor utama: polaritas ikatan dan geometri molekul. Ikatan polar saja tidak cukup untuk membuat molekul polar. Molekul menjadi polar jika resultan semua vektor dipol tidak nol.

Secara ringkas:

ikatan polar + susunan tidak saling meniadakan
→ molekul polar

ikatan polar + susunan simetris saling meniadakan
→ molekul nonpolar

Contoh BF_3 sangat penting. Ikatan B–F bersifat polar karena fluor lebih elektronegatif daripada boron. Namun, BF_3 berbentuk trigonal planar simetris. Tiga vektor dipol B–F tersusun dengan sudut 120° dan saling meniadakan. Karena itu, BF_3 nonpolar meskipun memiliki ikatan polar.

Contoh CH_4 juga penting. Molekul CH_4 memiliki struktur tetrahedral yang sangat simetris. Distribusi ikatan C–H tersusun sedemikian rupa sehingga resultan dipol molekul nol. Oleh karena itu, CH_4 nonpolar.

Contoh NH_3 menunjukkan keadaan berbeda. NH_3 memiliki bentuk piramidal trigonal karena adanya pasangan elektron bebas pada nitrogen. Geometri ini tidak membuat vektor dipol N–H saling meniadakan sepenuhnya. Akibatnya, NH_3 memiliki momen dipol tidak nol dan bersifat polar.

Dengan memahami hal ini, mahasiswa dapat menjelaskan polaritas molekul secara lebih ilmiah, bukan hanya berdasarkan ingatan.

6. Memahami Hubungan Simetri dengan Aktivitas Optik dan Spektroskopi

Tujuan keenam adalah memperkenalkan secara awal bahwa simetri tidak hanya berkaitan dengan polaritas, tetapi juga dengan **aktivitas optik** dan **spektroskopi molekul**. Walaupun pembahasan rinci akan diberikan pada subbab dasar teori dan bab-bab lanjutan, mahasiswa perlu mengetahui sejak awal bahwa simetri memiliki konsekuensi luas.

Dalam teori grup, simetri dapat digunakan untuk menentukan apakah suatu mode vibrasi aktif IR atau Raman. Secara umum, perubahan momen dipol selama vibrasi berkaitan dengan aktivitas IR. Perubahan polarisabilitas berkaitan dengan aktivitas Raman. Molekul dengan pusat inversi sering mengikuti aturan eksklusi tertentu, yaitu mode yang aktif IR tidak aktif Raman dan sebaliknya, meskipun pembahasan teknisnya memerlukan tabel karakter dan teori representasi.

Simetri juga berkaitan dengan aktivitas optik. Molekul yang kiral tidak memiliki bidang cermin, pusat inversi, atau sumbu rotasi tidak proper tertentu. Molekul kiral dapat memutar bidang polarisasi cahaya. Dalam Praktikum 5, molekul model yang dipilih belum diarahkan secara khusus pada kiralitas kompleks, tetapi konsep bahwa simetri berkaitan dengan aktivitas optik perlu diperkenalkan agar mahasiswa melihat luasnya peran simetri dalam kimia.

Dengan demikian, tujuan praktikum ini tidak berhenti pada polaritas. Polaritas adalah pintu masuk. Setelah mahasiswa memahami hubungan simetri dan momen dipol, mereka akan lebih siap memahami hubungan simetri dengan spektrum IR, Raman, transisi elektronik, dan aktivitas optik.

7. Menggunakan Software untuk Memvisualisasikan dan Menguji Simetri

Tujuan ketujuh adalah agar mahasiswa mampu menggunakan software untuk membantu visualisasi dan analisis simetri. Software tidak menggantikan pemahaman konsep, tetapi membantu mahasiswa melihat molekul dalam ruang tiga dimensi.

Dalam Praktikum 5, software memiliki peran sebagai berikut:

Software	Peran dalam Tujuan Praktikum
ChemCompute	Optimasi geometri dan perhitungan momen dipol
Avogadro	Membuat dan memeriksa struktur molekul
Jmol	Memvisualisasikan molekul tiga dimensi
Symmetry tools	Membantu identifikasi unsur simetri dan kelompok titik
ORCA	Menghitung geometri dan momen dipol
Gaussian	Menghitung geometri dan momen dipol
Python	Mengolah koordinat, menghitung pusat massa, vektor dipol sederhana, dan visualisasi

Mahasiswa harus memahami bahwa software dapat membantu, tetapi tidak boleh membuat mahasiswa pasif. Misalnya, jika symmetry tools memberi hasil kelompok titik C_{2v} untuk H_2O , mahasiswa tetap harus dapat menjelaskan mengapa H_2O termasuk C_{2v} . Jika ORCA atau Gaussian memberikan momen dipol nol untuk CO_2 , mahasiswa harus dapat menjelaskan bahwa dua vektor dipol $C=O$ saling meniadakan karena molekul linear dan simetris.

Dengan kata lain, software adalah alat verifikasi dan visualisasi, bukan pengganti penalaran.

8. Menggunakan Python untuk Analisis Vektor Dipol Sederhana

Tujuan kedelapan adalah agar mahasiswa mampu menggunakan Python untuk analisis vektor dipol sederhana. Dalam jalur Python mandiri, mahasiswa akan memasukkan koordinat molekul, menghitung pusat massa, memperkirakan vektor dipol dari muatan parsial, menentukan polar atau nonpolar berdasarkan besar momen dipol, memvisualisasikan vektor dipol, dan membuat tabel klasifikasi kelompok titik secara manual.

Secara sederhana, vektor dipol dapat dipahami sebagai hasil penjumlahan kontribusi muatan terhadap posisi:

$$\mu = \sum q_i r_i$$

Dalam rumus tersebut, q_i adalah muatan parsial atom ke- i , sedangkan r_i adalah vektor posisi atom ke- i terhadap acuan tertentu. Dalam praktikum dasar, pendekatan ini digunakan sebagai model sederhana. Nilai yang diperoleh tidak selalu identik dengan hasil perhitungan kuantum tingkat tinggi, tetapi berguna untuk memahami konsep bahwa momen dipol adalah resultan vektor dari distribusi muatan.

Python membantu mahasiswa melihat bahwa polaritas dapat dihitung dan divisualisasikan. Jika vektor resultan mendekati nol, molekul diklasifikasikan sebagai nonpolar. Jika vektor resultan tidak nol, molekul diklasifikasikan sebagai polar. Namun, mahasiswa harus memahami bahwa hasil Python dalam praktikum ini bergantung pada muatan parsial yang digunakan. Jika muatan parsial berbeda, nilai vektor dipol dapat berubah.

Tujuan pembelajaran di sini bukan membuat Python menggantikan perhitungan momen dipol kuantum, tetapi membuat mahasiswa memahami logika vektorial di balik polaritas molekul.

9. Indikator Keberhasilan Praktikum

Setelah menyelesaikan Praktikum 5, mahasiswa diharapkan mampu mencapai indikator berikut:

1. Menjelaskan pengertian simetri molekul.
2. Membedakan operasi simetri dan unsur simetri.
3. Mengidentifikasi sumbu rotasi, bidang cermin, pusat inversi, dan unsur simetri lain pada molekul sederhana.
4. Menentukan kelompok titik H₂O, NH₃, BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena.
5. Menjelaskan hubungan antara bentuk molekul dan momen dipol.
6. Menjelaskan mengapa H₂O polar sedangkan CO₂ nonpolar.
7. Menjelaskan mengapa BF₃ nonpolar meskipun memiliki ikatan B–F polar.
8. Menggunakan software untuk membangun dan memvisualisasikan struktur molekul.
9. Mengambil data momen dipol dari hasil perhitungan ChemCompute, ORCA, atau Gaussian.
10. Menggunakan Python untuk menghitung pusat massa dan vektor dipol sederhana.

11. Menyusun tabel molekul, kelompok titik, momen dipol, dan klasifikasi polar/nonpolar.
12. Menulis analisis yang menghubungkan simetri dengan polaritas secara kritis.
13. Menyebutkan keterbatasan analisis berbasis model muatan parsial.
14. Menjelaskan secara awal hubungan simetri dengan spektrum molekul.

Indikator ini menunjukkan bahwa Praktikum 5 menuntut perpaduan antara konsep, visualisasi, perhitungan, dan penulisan ilmiah. Mahasiswa tidak cukup hanya menentukan kelompok titik. Mereka harus mengaitkan kelompok titik tersebut dengan momen dipol dan polaritas.

10. Keterampilan Konseptual yang Diharapkan

Keterampilan konseptual utama dalam Praktikum 5 adalah kemampuan melihat molekul sebagai objek tiga dimensi yang memiliki struktur simetri. Mahasiswa harus mampu membayangkan molekul diputar, dicerminkan, atau dibalik, lalu menentukan apakah hasilnya identik dengan struktur awal. Keterampilan ini memerlukan latihan visual dan spasial.

Mahasiswa juga harus mampu memahami bahwa molekul polar dan nonpolar tidak cukup ditentukan dari ada atau tidaknya ikatan polar. CO_2 dan BF_3 menjadi contoh penting. Keduanya memiliki ikatan polar, tetapi molekulnya nonpolar karena vektor dipol saling meniadakan. H_2O dan NH_3 menjadi contoh berlawanan. Keduanya memiliki bentuk yang tidak membuat vektor dipol saling meniadakan, sehingga memiliki momen dipol tidak nol.

Keterampilan ini akan membantu mahasiswa dalam banyak topik kimia lain, seperti gaya antarmolekul, kelarutan, titik didih, spektroskopi IR, struktur kristal, dan reaktivitas molekul.

11. Keterampilan Komputasional yang Diharapkan

Selain keterampilan konseptual, mahasiswa juga diharapkan mengembangkan keterampilan komputasional. Dalam Praktikum 5, keterampilan tersebut meliputi:

1. Membuat struktur molekul menggunakan Avogadro atau software sejenis.
2. Menjalankan optimasi geometri melalui ChemCompute atau software kimia komputasi.
3. Membaca momen dipol dari output perhitungan.
4. Menyimpan data momen dipol secara tertib.
5. Menggunakan Python untuk analisis vektor sederhana.
6. Membuat visualisasi vektor dipol.
7. Membuat grafik batang momen dipol.
8. Menyimpan hasil analisis dalam CSV.
9. Menghubungkan hasil komputasi dengan teori simetri.

Keterampilan ini penting karena praktikum kimia kuantum modern tidak lagi hanya berupa pengamatan manual. Mahasiswa perlu terbiasa bekerja dengan file, output, data, kode, grafik, dan laporan. Praktikum 5 menjadi latihan untuk membangun kebiasaan tersebut.

12. Keterampilan Analitis yang Diharapkan

Keterampilan analitis dalam Praktikum 5 tampak ketika mahasiswa menjelaskan mengapa molekul tertentu polar atau nonpolar. Jawaban yang baik tidak cukup berbentuk:

CO2 nonpolar karena bentuknya linear.

Jawaban yang lebih lengkap adalah:

CO2 nonpolar karena memiliki struktur linear dan simetris. Meskipun setiap ikatan C=O bersifat polar, dua vektor dipol ikatan tersebut memiliki besar yang sama dan arah berlawanan, sehingga resultannya nol.

Demikian pula, jawaban kurang lengkap seperti:

H2O polar karena ada oksigen.

harus diperbaiki menjadi:

H2O polar karena memiliki dua ikatan O-H polar dan bentuk molekul bengkok. Vektor dipol kedua ikatan tidak saling meniadakan, sehingga resultan momen dipol molekul tidak nol.

Keterampilan analitis seperti ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami hubungan antara struktur, simetri, vektor dipol, dan polaritas.

13. Sikap Ilmiah yang Diharapkan

Praktikum 5 juga bertujuan membentuk sikap ilmiah. Mahasiswa harus teliti dalam membangun struktur molekul, memeriksa geometri, mencatat kelompok titik, membaca output momen dipol, dan menafsirkan hasil. Kesalahan kecil dalam geometri dapat mengubah simetri. Misalnya, jika struktur BF3 tidak benar-benar trigonal planar karena geometri awal tidak rapi atau optimasi gagal, hasil momen dipol dapat tidak nol secara numerik. Mahasiswa harus mampu membedakan apakah nilai kecil tersebut bermakna kimia atau hanya akibat ketidaksempurnaan geometri dan toleransi komputasi.

Sikap ilmiah yang ditekankan meliputi:

1. Tidak tergesa-gesa menyimpulkan.

2. Memeriksa geometri sebelum menganalisis.
3. Memastikan output perhitungan selesai normal.
4. Membandingkan hasil komputasi dengan teori.
5. Menyadari batas pendekatan muatan parsial.
6. Menulis interpretasi secara hati-hati.
7. Menghindari klaim yang terlalu mutlak.

Dengan sikap ini, mahasiswa akan lebih siap menghadapi praktikum kimia kuantum yang lebih lanjut.

14. Transisi ke Dasar Teori

Subbab 8.1 telah menjelaskan tujuan Praktikum 5 secara menyeluruh. Mahasiswa diharapkan mampu mengidentifikasi unsur simetri, menentukan kelompok titik, menghubungkan simetri dengan momen dipol, membedakan molekul polar dan nonpolar, menggunakan software untuk visualisasi serta perhitungan, dan menggunakan Python untuk analisis vektor dipol sederhana.

Subbab berikutnya akan membahas dasar teori. Pada subbab 8.2, pembahasan akan diarahkan pada operasi simetri, unsur simetri, kelompok titik, polaritas, dan aktivitas optik. Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap mempelajari teori simetri molekul secara terarah dan menghubungkannya dengan hasil praktikum.

8.2 Dasar Teori

Dasar teori Praktikum 5 membahas **operasi simetri, unsur simetri, kelompok titik, polaritas, dan aktivitas optik**. Kelima konsep ini saling berkaitan dan menjadi fondasi untuk memahami mengapa suatu molekul memiliki momen dipol tidak nol, mengapa molekul tertentu nonpolar meskipun memiliki ikatan polar, serta mengapa simetri molekul sangat penting dalam spektroskopi dan kimia kuantum.

Simetri dalam kimia bukan sekadar keindahan bentuk. Simetri adalah bahasa ilmiah untuk menjelaskan keteraturan molekul. Melalui simetri, mahasiswa dapat memahami hubungan antara bentuk molekul, distribusi muatan, orbital, vibrasi, spektrum, dan sifat fisik. Dalam kimia kuantum, simetri digunakan untuk menyederhanakan persamaan, mengelompokkan orbital, menentukan kemungkinan transisi, dan membaca sifat molekul. Dalam kimia fisik, simetri membantu menjelaskan momen dipol dan aktivitas spektrum. Dalam kimia anorganik, simetri menjadi dasar pembahasan struktur kompleks, teori medan ligan, dan pemisahan orbital d. Dalam spektroskopi, simetri membantu menentukan apakah suatu mode vibrasi aktif IR atau Raman.

Secara historis, konsep simetri dalam kimia berkembang dari teori grup matematika yang kemudian diterapkan pada molekul. Teori grup awalnya merupakan cabang matematika abstrak, tetapi kemudian menjadi alat penting dalam fisika dan kimia. Dalam kimia molekul, karya-karya seperti Cotton, Bishop, Carter, Atkins, Friedman, Harris, Bertolucci, serta Levine memperlihatkan bahwa teori grup dapat digunakan untuk menjelaskan sifat molekul secara sistematis. Bagi

mahasiswa praktikum dasar, teori grup tidak perlu dipahami secara terlalu formal, tetapi gagasan utamanya harus dikuasai: molekul dapat diklasifikasikan berdasarkan operasi simetri yang membuatnya tampak tidak berubah.

Praktikum 5 menggunakan molekul model H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena. Molekul-molekul ini dipilih karena memperlihatkan variasi simetri dan polaritas yang jelas. H_2O dan NH_3 polar karena bentuknya tidak membuat vektor dipol saling meniadakan. BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena memiliki simetri yang lebih tinggi sehingga dalam banyak kasus resultan momen dipolnya nol. Perbedaan ini menjadi pusat pembelajaran Bab 8.

1. Pengertian Simetri Molekul

Simetri molekul adalah keteraturan susunan atom dalam molekul yang menyebabkan molekul tampak tidak berubah setelah dikenai operasi tertentu, seperti diputar, dicerminkan, atau diinversikan. Suatu molekul dikatakan memiliki operasi simetri tertentu jika setelah operasi tersebut dilakukan, posisi atom-atomnya menjadi ekuivalen dengan posisi semula.

Contoh sederhana adalah molekul air, H_2O . Jika molekul H_2O diputar 180° terhadap sumbu tertentu yang melalui atom O dan membelah sudut $\text{H}-\text{O}-\text{H}$, posisi dua atom H saling bertukar, tetapi molekul secara keseluruhan tetap tampak sama. Ini menunjukkan adanya operasi rotasi C_2 . Selain itu, H_2O memiliki bidang simetri karena molekul dapat dicerminkan terhadap bidang tertentu dan tetap menghasilkan susunan atom yang ekuivalen.

Dalam kimia, simetri tidak hanya diamati secara visual. Simetri harus dianalisis dengan aturan yang jelas. Dua posisi atom disebut ekuivalen jika setelah operasi simetri, atom tersebut menempati posisi atom sejenis dalam molekul. Misalnya, atom H pada H_2O dapat saling bertukar karena keduanya identik. Namun, atom H tidak dapat dianggap ekuivalen dengan atom O karena jenis atomnya berbeda.

Dengan demikian, simetri molekul selalu mempertimbangkan dua hal:

1. **Geometri ruang**, yaitu posisi atom dalam molekul.
2. **Identitas atom**, yaitu apakah atom yang berpindah setelah operasi merupakan atom sejenis.

Molekul yang secara bentuk tampak simetris belum tentu memiliki simetri tinggi jika atom-atomnya berbeda. Sebaliknya, molekul yang tampak sederhana dapat memiliki simetri penting yang memengaruhi sifatnya.

2. Operasi Simetri dan Unsur Simetri

Dalam teori simetri molekul, terdapat dua istilah yang harus dibedakan: **operasi simetri** dan **unsur simetri**.

Operasi simetri adalah tindakan yang dilakukan terhadap molekul, seperti memutar, mencerminkan, atau melakukan inversi. **Unsur simetri** adalah objek geometris yang menjadi acuan operasi tersebut, misalnya sumbu, bidang, atau titik.

Perbedaannya dapat diringkas sebagai berikut:

Istilah	Pengertian	Contoh
Operasi simetri	Tindakan terhadap molekul	Rotasi 180° , refleksi, inversi
Unsur simetri	Acuan geometris operasi	Sumbu C_2 , bidang σ , pusat i

Contoh pada NH_3 :

Unsur simetri : sumbu C_3

Operasi simetri: rotasi 120° terhadap sumbu C_3

Contoh pada H_2O :

Unsur simetri : bidang cermin σ

Operasi simetri: refleksi terhadap bidang σ

Pembedaan ini penting karena mahasiswa sering menyebut “molekul memiliki rotasi” tanpa menyebut sumbu rotasinya, atau menyebut “molekul memiliki bidang” tanpa menjelaskan operasi refleksinya. Dalam analisis kelompok titik, keduanya harus dipahami secara tepat.

3. Operasi Identitas E

Operasi simetri paling dasar adalah **identitas**, dilambangkan dengan E . Operasi identitas berarti molekul tidak diubah sama sekali. Setiap molekul pasti memiliki operasi identitas karena jika tidak dilakukan apa pun, molekul tentu tetap sama.

Meskipun tampak sepele, identitas sangat penting dalam teori grup. Suatu kelompok simetri selalu harus memiliki identitas. Dalam konteks praktikum, mahasiswa cukup memahami bahwa E selalu ada pada semua kelompok titik, baik molekul sangat simetris seperti CH_4 maupun molekul dengan simetri rendah.

Contoh:

H_2O memiliki E .

NH_3 memiliki E .

BF_3 memiliki E .

CH₄ memiliki E.
 CO₂ memiliki E.
 Benzena memiliki E.

Identitas mengingatkan bahwa setiap molekul memiliki setidaknya satu operasi simetri, yaitu tidak melakukan perubahan apa pun. Molekul yang hanya memiliki E termasuk kelompok titik C₁, yaitu kelompok titik dengan simetri paling rendah.

4. Sumbu Rotasi Proper C_n

Sumbu rotasi proper dilambangkan dengan C_n. Jika molekul diputar sebesar $360^\circ/n$ terhadap suatu sumbu dan setelah rotasi molekul tampak sama, maka molekul memiliki sumbu rotasi C_n.

Rumus sudut rotasi:

$$\text{sudut rotasi} = 360^\circ / n$$

Contoh:

Sumbu	Sudut Rotasi	Contoh Molekul
C ₂	180°	H ₂ O, C ₂ H ₄
C ₃	120°	NH ₃ , BF ₃
C ₄	90°	beberapa kompleks bujur sangkar
C ₆	60°	benzena

Pada H₂O, terdapat sumbu C₂. Jika molekul diputar 180° melalui sumbu yang melewati atom O dan membelah sudut H–O–H, dua atom H saling bertukar dan molekul tetap ekuivalen.

Pada NH₃, terdapat sumbu C₃. Jika molekul diputar 120° terhadap sumbu yang melewati atom N dan pusat segitiga H₃, tiga atom H saling bertukar posisi, tetapi molekul tetap sama.

Pada benzena, terdapat sumbu C₆ yang tegak lurus bidang cincin. Jika benzena diputar 60°, setiap atom C dan H menempati posisi atom sejenis berikutnya, sehingga molekul tetap ekuivalen.

Sumbu rotasi proper merupakan unsur simetri yang sangat penting karena sering menjadi langkah awal menentukan kelompok titik molekul. Dalam prosedur identifikasi kelompok titik, mahasiswa biasanya mencari sumbu rotasi dengan orde tertinggi terlebih dahulu.

5. Bidang Cermin σ

Bidang cermin dilambangkan dengan σ . Jika molekul dicerminkan terhadap suatu bidang dan hasilnya ekuivalen dengan molekul semula, maka molekul memiliki bidang simetri.

Ada beberapa jenis bidang cermin yang sering dibahas:

Jenis Bidang	Keterangan
σ_v	Bidang vertikal yang memuat sumbu utama
σ_h	Bidang horizontal yang tegak lurus sumbu utama
σ_d	Bidang diagonal yang membelah sudut antara sumbu-sumbu C_2

Contoh H_2O memiliki bidang simetri. Molekul air dapat dicerminkan terhadap bidang molekulnya, dan juga terhadap bidang yang membelah sudut $H-O-H$ secara tepat, bergantung orientasi sumbu yang digunakan dalam analisis kelompok titik. Karena itu, H_2O termasuk kelompok titik C_{2v} .

BF_3 memiliki bidang molekul sebagai σ_h jika sumbu utama C_3 tegak lurus terhadap bidang molekul. Molekul BF_3 juga memiliki beberapa bidang vertikal yang memuat sumbu C_3 dan melewati ikatan $B-F$.

Benzena memiliki bidang horizontal, yaitu bidang molekul itu sendiri, serta banyak bidang vertikal. Inilah salah satu alasan benzena memiliki simetri tinggi dan termasuk kelompok titik D_{6h} .

Bidang cermin juga penting dalam pembahasan aktivitas optik. Molekul yang memiliki bidang cermin tidak kiral. Oleh karena itu, keberadaan bidang cermin dapat digunakan sebagai indikator bahwa molekul tidak bersifat optik aktif dalam arti kiralitas molekul tunggal.

6. Pusat Inversi i

Pusat inversi dilambangkan dengan i . Suatu molekul memiliki pusat inversi jika setiap atom pada koordinat (x, y, z) memiliki atom identik pada koordinat $(-x, -y, -z)$ terhadap titik pusat tertentu.

Contoh paling mudah adalah CO_2 . Jika atom C dianggap berada di pusat, maka atom O di satu sisi memiliki pasangan atom O identik di sisi berlawanan. Dengan demikian, CO_2 memiliki pusat inversi. Benzena juga memiliki pusat inversi di pusat cincin karena setiap atom memiliki pasangan identik pada posisi berlawanan.

Secara konseptual:

Jika setiap atom memiliki pasangan identik di posisi berlawanan terhadap suatu titik pusat, maka molekul memiliki pusat inversi.

Pusat inversi penting dalam beberapa aspek kimia. Pertama, molekul dengan pusat inversi tidak memiliki momen dipol permanen. Kedua, pusat inversi penting dalam aturan aktivitas IR dan Raman. Untuk molekul yang memiliki pusat inversi, berlaku prinsip eksklusi tertentu: mode vibrasi yang aktif IR tidak aktif Raman, dan mode yang aktif Raman tidak aktif IR. Pembahasan

rinci memerlukan teori grup dan tabel karakter, tetapi konsep dasarnya perlu dikenalkan sejak Praktikum 5.

Keberadaan pusat inversi juga berarti molekul tidak kiral. Molekul yang memiliki pusat inversi pasti dapat ditumpangtindihkan dengan bayangan cerminnya.

7. Sumbu Rotasi Tidak Proper S_n

Sumbu rotasi tidak proper dilambangkan dengan S_n . Operasi S_n merupakan gabungan dari rotasi C_n diikuti refleksi terhadap bidang yang tegak lurus sumbu rotasi tersebut. Dengan kata lain, molekul diputar terlebih dahulu, lalu dicerminkan.

Secara ringkas:

S_n = rotasi C_n + refleksi terhadap bidang tegak lurus sumbu

Sumbu rotasi tidak proper sering lebih sulit dipahami oleh mahasiswa karena tidak selalu mudah divisualisasikan. Namun, konsep ini penting dalam penentuan kiralitas dan kelompok titik tertentu. Molekul yang memiliki sumbu rotasi tidak proper tidak kiral.

Secara khusus:

S_1 setara dengan bidang cermin σ .

S_2 setara dengan pusat inversi i .

Pernyataan ini penting karena membantu menghubungkan simetri dengan aktivitas optik. Jika molekul memiliki σ , i , atau S_n , maka molekul tersebut umumnya tidak kiral. Molekul kiral tidak boleh memiliki sumbu rotasi tidak proper.

Dalam Praktikum 5, pembahasan S_n cukup bersifat pengantar. Mahasiswa tidak perlu mencari semua sumbu S_n secara mendalam untuk setiap molekul, tetapi perlu memahami bahwa unsur ini merupakan bagian dari simetri molekul dan berkaitan dengan kiralitas.

8. Kelompok Titik Molekul

Kelompok titik adalah kumpulan operasi simetri yang dimiliki molekul, dengan syarat operasi tersebut meninggalkan setidaknya satu titik tetap. Istilah “kelompok” berasal dari teori grup matematika, sedangkan “titik” menunjukkan bahwa dalam operasi simetri molekul, terdapat titik tertentu yang tetap tidak berpindah.

Kelompok titik digunakan untuk mengklasifikasikan molekul berdasarkan simetrinya. Daripada menyebut satu per satu semua operasi simetri, kimiawan cukup menyebut nama kelompok titik.

Misalnya, H_2O disebut memiliki kelompok titik C_{2v} . Dari simbol ini, pembaca yang memahami teori simetri langsung mengetahui bahwa H_2O memiliki sumbu C_2 dan bidang-bidang vertikal.

Beberapa kelompok titik yang penting dalam Praktikum 5 adalah:

Kelompok Titik	Ciri Umum	Contoh
C_{2v}	Sumbu C_2 dan bidang vertikal	H_2O
C_{3v}	Sumbu C_3 dan bidang vertikal	NH_3
D_{3h}	Sumbu C_3 , sumbu C_2 , bidang horizontal	BF_3
T^d	Simetri tetrahedral	CH_4
$\text{D}_{\infty h}$	Linear dengan pusat inversi	CO_2
D_{2h}	Sumbu C_2 dan pusat inversi	C_2H_4
D_{6h}	Simetri tinggi cincin planar	Benzena

Kelompok titik adalah konsep yang sangat penting karena menghubungkan geometri dengan sifat. Dari kelompok titik, mahasiswa dapat memperkirakan apakah molekul polar, apakah memiliki pusat inversi, apakah mungkin kiral, serta bagaimana mode vibrasi dapat diklasifikasikan.

9. Penentuan Kelompok Titik secara Konseptual

Untuk menentukan kelompok titik, mahasiswa dapat menggunakan alur berpikir berikut:

1. Apakah molekul linear?
2. Jika linear, apakah memiliki pusat inversi?
3. Jika tidak linear, cari sumbu rotasi dengan orde tertinggi.
4. Periksa apakah ada sumbu C_2 yang tegak lurus sumbu utama.
5. Periksa bidang cermin.
6. Periksa pusat inversi.
7. Periksa sumbu rotasi tidak proper jika diperlukan.
8. Cocokkan unsur simetri dengan kelompok titik.

Contoh untuk H_2O :

H_2O tidak linear.
 Memiliki sumbu C_2 .
 Memiliki bidang cermin vertikal.
 Tidak memiliki pusat inversi.
 Kelompok titik: C_{2v} .

Contoh untuk NH_3 :

NH_3 tidak linear.
 Memiliki sumbu C_3 .
 Memiliki tiga bidang cermin vertikal.
 Tidak memiliki pusat inversi.

Kelompok titik: C_{3v} .

Contoh untuk BF_3 :

BF_3 trigonal planar.

Memiliki sumbu C_3 .

Memiliki tiga sumbu C_2 tegak lurus C_3 .

Memiliki bidang horizontal.

Kelompok titik: D_{3h} .

Contoh untuk CO_2 :

CO_2 linear.

Memiliki pusat inversi.

Kelompok titik: $D_{\infty h}$.

Penentuan kelompok titik harus dilakukan berdasarkan struktur teroptimasi atau struktur ideal yang benar. Jika geometri input rusak, hasil identifikasi simetri dapat salah.

10. Polaritas Molekul dan Momen Dipol

Momen dipol adalah besaran vektor yang menunjukkan pemisahan muatan dalam molekul. Secara sederhana, momen dipol muncul ketika pusat muatan positif dan pusat muatan negatif tidak berimpit. Momen dipol molekul sering dinyatakan dalam satuan Debye.

Secara konseptual, momen dipol dapat ditulis sebagai:

$$\mu = \sum q_i r_i$$

dengan q_i sebagai muatan atom ke- i dan r_i sebagai vektor posisi atom ke- i . Rumus ini menunjukkan bahwa momen dipol bergantung pada distribusi muatan dan posisi atom dalam ruang.

Molekul dikatakan **polar** jika memiliki momen dipol permanen tidak nol. Molekul dikatakan **nonpolar** jika resultan momen dipolnya nol. Namun, penting untuk ditekankan bahwa molekul dengan ikatan polar belum tentu polar. Polaritas molekul ditentukan oleh resultan semua vektor dipol, bukan oleh satu ikatan saja.

Contoh utama:

Molekul	Ikatan Polar	Bentuk	Momen Dipol	Kesimpulan
H_2O	O–H polar	Bengkok	Tidak nol	Polar
CO_2	C=O polar	Linear	Nol	Nonpolar
BF_3	B–F polar	Trigonal planar	Nol	Nonpolar
NH_3	N–H polar	Piramidal trigonal	Tidak nol	Polar

CH ₄	C–H relatif lemah polar	Tetrahedral	Nol	Nonpolar

Perbandingan ini menunjukkan bahwa bentuk molekul dan simetri menentukan apakah vektor-vektor dipol saling meniadakan atau tidak.

11. Hubungan Simetri dengan Momen Dipol

Simetri dapat menentukan apakah molekul mungkin memiliki momen dipol permanen. Jika operasi simetri molekul menyebabkan setiap vektor dipol harus ditiadakan oleh vektor lain yang ekuivalen, maka momen dipol total nol. Sebaliknya, jika simetri molekul tidak cukup untuk meniadakan semua komponen vektor dipol, molekul dapat bersifat polar.

Secara umum, molekul yang sangat simetris cenderung nonpolar. Contohnya BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena. Molekul-molekul ini memiliki susunan atom yang membuat vektor dipol saling meniadakan.

Sebaliknya, molekul dengan simetri lebih rendah dapat polar. H₂O termasuk C_{2v} dan memiliki momen dipol tidak nol. NH₃ termasuk C_{3v} dan memiliki momen dipol tidak nol. Kelompok titik C_{2v} dan C_{3v} memungkinkan adanya momen dipol sepanjang arah tertentu.

Secara konseptual:

simetri tinggi + vektor dipol saling meniadakan
 → momen dipol nol
 → nonpolar

simetri lebih rendah + resultan vektor dipol tersisa
 → momen dipol tidak nol
 → polar

Namun, mahasiswa harus berhati-hati. Tidak semua molekul dengan simetri rendah pasti memiliki momen dipol besar. Besar momen dipol juga bergantung pada polaritas ikatan dan distribusi muatan. Simetri menentukan kemungkinan, tetapi nilai momen dipol ditentukan oleh struktur elektronik dan distribusi muatan.

12. Contoh H₂O dan CO₂: Ikatan Polar Tidak Selalu Menghasilkan Molekul Polar

Perbandingan H₂O dan CO₂ adalah contoh klasik yang harus dikuasai mahasiswa.

H₂O memiliki dua ikatan O–H yang polar. Bentuk molekulnya bengkok karena adanya pasangan elektron bebas pada atom O. Akibat bentuk bengkok ini, vektor dipol O–H tidak saling meniadakan. Resultan vektor dipol mengarah ke sekitar atom O. Oleh karena itu, H₂O bersifat polar.

CO₂ memiliki dua ikatan C=O yang juga polar. Namun, molekul CO₂ berbentuk linear. Dua vektor dipol C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan. Karena itu, resultannya nol. CO₂ bersifat nonpolar.

Perbedaan ini dapat diringkas:

H₂O:
ikatan polar + bentuk bengkok
→ vektor dipol tidak saling meniadakan
→ polar

CO₂:
ikatan polar + bentuk linear simetris
→ vektor dipol saling meniadakan
→ nonpolar

Contoh ini penting karena membongkar miskonsepsi umum bahwa semua molekul dengan ikatan polar pasti polar. Polaritas molekul harus dianalisis secara vektorial.

13. Contoh BF₃ dan NH₃: Trigonal Planar vs Piramidal Trigonal

BF₃ dan NH₃ sama-sama memiliki tiga atom di sekitar atom pusat, tetapi polaritasnya berbeda karena bentuk dan simetrinya berbeda.

BF₃ berbentuk trigonal planar. Tiga ikatan B–F tersusun dalam satu bidang dengan sudut sekitar 120°. Meskipun ikatan B–F polar, tiga vektor dipol tersusun simetris dan saling meniadakan. Oleh karena itu, BF₃ bersifat nonpolar.

NH₃ berbentuk piramidal trigonal. Tiga ikatan N–H tidak berada dalam susunan planar simetris seperti BF₃ karena ada pasangan elektron bebas pada atom N. Bentuk piramidal menyebabkan vektor dipol tidak saling meniadakan. Akibatnya, NH₃ memiliki momen dipol tidak nol dan bersifat polar.

Perbandingan:

Molekul	Bentuk	Kelompok Titik	Resultan Dipol
BF ₃	Trigonal planar	D _{3h}	Nol
NH ₃	Piramidal trigonal	C _{3v}	Tidak nol

Analisis ini menunjukkan bahwa jumlah ikatan di sekitar atom pusat tidak cukup untuk menentukan polaritas. Geometri tiga dimensi dan simetri harus dianalisis.

14. Contoh CH₄, C₂H₄, dan Benzena: Simetri Tinggi dan Nonpolaritas

CH_4 memiliki bentuk tetrahedral dengan kelompok titik T_d . Empat ikatan C–H tersusun sangat simetris. Jika ada komponen dipol kecil pada masing-masing ikatan, resultannya saling meniadakan. Karena itu, CH_4 bersifat nonpolar.

C_2H_4 atau etilena berbentuk planar dan memiliki kelompok titik D_{2h} pada struktur ideal. Molekul ini memiliki beberapa unsur simetri, termasuk pusat inversi. Karena pusat inversi meniadakan kemungkinan adanya momen dipol permanen, etilena bersifat nonpolar.

Benzena memiliki simetri sangat tinggi dengan kelompok titik D_{6h} . Molekul ini planar, aromatik, dan memiliki pusat inversi serta banyak unsur simetri lain. Distribusi elektron dan susunan atomnya sangat simetris, sehingga momen dipol total nol.

Contoh-contoh ini menegaskan bahwa simetri tinggi sering menyebabkan nonpolaritas. Namun, simetri tinggi bukan sekadar “bentuk bagus”. Simetri tinggi berarti operasi simetri molekul memaksa vektor-vektor dipol saling meniadakan.

15. Aktivitas Optik dan Kiralitas

Aktivitas optik adalah kemampuan suatu zat untuk memutar bidang polarisasi cahaya. Dalam kimia molekul, aktivitas optik berkaitan erat dengan **kiralitas**. Molekul kiral adalah molekul yang tidak dapat ditumpangtindihkan dengan bayangan cerminnya. Molekul kiral tidak memiliki bidang cermin, pusat inversi, atau sumbu rotasi tidak proper.

Secara sederhana:

```
molekul kiral
→ tidak memiliki  $\sigma$ 
→ tidak memiliki  $i$ 
→ tidak memiliki  $S_n$ 
→ dapat bersifat optik aktif
```

Sebaliknya, jika molekul memiliki bidang cermin atau pusat inversi, molekul tersebut tidak kiral. Dalam Praktikum 5, molekul model seperti H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena bukan contoh utama molekul kiral. Namun, pembahasan aktivitas optik tetap penting karena menunjukkan bahwa simetri memiliki konsekuensi lebih luas daripada polaritas.

Perlu juga dibedakan antara molekul polar dan molekul kiral. Molekul polar belum tentu kiral. H_2O polar, tetapi tidak kiral karena memiliki bidang simetri. NH_3 polar, tetapi tidak kiral dalam bentuk sederhana karena memiliki bidang simetri. Molekul kiral tidak harus memiliki momen dipol besar. Dengan demikian, polaritas dan kiralitas adalah dua konsep berbeda, meskipun keduanya sama-sama berkaitan dengan simetri.

16. Simetri dan Spektrum Molekul

Simetri juga sangat penting dalam spektroskopi. Dalam spektroskopi IR, suatu mode vibrasi aktif jika vibrasi tersebut menyebabkan perubahan momen dipol. Dalam spektroskopi Raman, suatu mode vibrasi aktif jika vibrasi tersebut menyebabkan perubahan polarisabilitas. Teori grup membantu menentukan mode mana yang aktif IR atau Raman berdasarkan sifat simetri mode vibrasi.

Secara sederhana:

Jenis Spektrum	Syarat Umum Aktivitas
IR	Ada perubahan momen dipol selama vibrasi
Raman	Ada perubahan polarisabilitas selama vibrasi

Contoh CO₂ penting. CO₂ sebagai molekul linear nonpolar memiliki mode vibrasi tertentu yang dapat aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol. Mode regangan simetris CO₂ tidak menghasilkan perubahan momen dipol dan tidak aktif IR, sedangkan mode regangan antisimetri dapat menghasilkan perubahan momen dipol dan aktif IR. Pembahasan rinci memerlukan teori vibrasi dan tabel karakter, tetapi gagasan dasarnya harus dikenalkan sejak awal.

Simetri juga membantu memahami mengapa beberapa transisi elektronik diperbolehkan atau dilarang. Dalam kimia kuantum, aturan seleksi sering berkaitan dengan simetri fungsi gelombang awal, operator transisi, dan fungsi gelombang akhir. Dengan demikian, simetri menjadi bahasa penting dalam membaca spektrum molekul.

17. Sintesis Literatur tentang Simetri Molekul

Literatur kimia fisik dan teori grup menunjukkan bahwa simetri merupakan alat konseptual yang sangat kuat. Cotton menekankan penggunaan teori grup untuk memahami struktur molekul, orbital, dan spektrum. Bishop dan Carter memberikan dasar sistematis mengenai operasi simetri, kelompok titik, dan aplikasi kimianya. Atkins dan Friedman menghubungkan simetri dengan mekanika kuantum molekul dan struktur elektronik. Levine menempatkan simetri sebagai bagian penting dari kimia kuantum, terutama dalam penyederhanaan orbital dan analisis spektrum. Harris dan Bertolucci membahas hubungan simetri dengan spektroskopi vibrasi.

Sintesis dari literatur tersebut menunjukkan bahwa simetri memiliki tiga fungsi utama dalam kimia:

1. **Fungsi klasifikasi**, yaitu mengelompokkan molekul berdasarkan kelompok titik.
2. **Fungsi prediksi**, yaitu memperkirakan sifat seperti polaritas, kiralitas, dan aktivitas spektrum.
3. **Fungsi penyederhanaan**, yaitu mengurangi kompleksitas analisis orbital, vibrasi, dan transisi.

Dalam konteks Praktikum 5, ketiga fungsi tersebut digunakan secara sederhana. Mahasiswa mengklasifikasikan molekul ke dalam kelompok titik, memprediksi polaritas dari simetri, dan menyederhanakan pemahaman momen dipol melalui resultan vektor.

18. Analisis Kritis terhadap Penggunaan Simetri

Meskipun simetri sangat kuat, penggunaannya harus hati-hati. Ada beberapa hal yang perlu dikritisi.

Pertama, simetri ideal tidak selalu sama dengan geometri hasil komputasi. Dalam perhitungan numerik, struktur molekul dapat sedikit menyimpang karena toleransi optimasi, kesalahan input, atau metode yang digunakan. Akibatnya, molekul yang secara teori sangat simetris dapat tampak memiliki momen dipol kecil tetapi tidak persis nol. Mahasiswa harus mampu membedakan antara nilai kecil akibat kesalahan numerik dan nilai bermakna secara kimia.

Kedua, penentuan kelompok titik dapat bergantung pada toleransi geometri. Software symmetry tools biasanya menggunakan ambang toleransi tertentu. Jika toleransi terlalu ketat, molekul hampir simetris dapat dianggap memiliki simetri rendah. Jika toleransi terlalu longgar, molekul yang sebenarnya terdistorsi dapat dianggap simetris.

Ketiga, polaritas tidak hanya ditentukan oleh kelompok titik secara nama. Mahasiswa tetap harus memahami vektor dipol dan distribusi muatan. Kelompok titik membantu memprediksi, tetapi interpretasi kimia memerlukan pemahaman struktur.

Keempat, aktivitas optik tidak boleh disamakan dengan polaritas. Molekul polar belum tentu optik aktif. Molekul optik aktif harus kiral. H_2O dan NH_3 polar, tetapi bukan molekul kiral sederhana.

Kelima, simetri molekul dapat berubah karena lingkungan. Molekul bebas di fase gas dapat memiliki simetri tertentu, tetapi dalam pelarut, kristal, permukaan katalis, atau medan listrik, simetri efektifnya dapat menurun.

Analisis kritis ini penting agar mahasiswa tidak menggunakan simetri sebagai hafalan kaku. Simetri adalah alat konseptual yang kuat, tetapi tetap harus diterapkan dengan kesadaran terhadap konteks dan batas model.

19. Aplikasi Simetri dalam Kimia

Simetri memiliki banyak aplikasi dalam kimia.

Pertama, dalam **kimia fisik**, simetri digunakan untuk memahami momen dipol, polaritas, spektrum IR, spektrum Raman, dan transisi elektronik.

Kedua, dalam **kimia anorganik**, simetri digunakan untuk menganalisis kompleks koordinasi, pemisahan orbital d, geometri ligan, dan teori medan kristal.

Ketiga, dalam **kimia organik**, simetri membantu memahami kiralitas, stereokimia, reaksi perisiklik, aromaticitas, dan kesetaraan atom dalam NMR.

Keempat, dalam **kimia komputasi**, simetri dapat digunakan untuk menyederhanakan perhitungan, mengklasifikasikan orbital, dan memvalidasi geometri molekul.

Kelima, dalam **spektroskopi**, simetri membantu menentukan mode vibrasi yang aktif IR atau Raman dan memahami aturan seleksi.

Dengan demikian, Praktikum 5 memiliki nilai lintas bidang. Mahasiswa yang memahami simetri akan lebih mudah mempelajari banyak topik kimia lanjutan.

20. Implikasi Pembelajaran Dasar Teori

Dasar teori dalam subbab ini memberi implikasi pembelajaran yang penting. Mahasiswa harus belajar bahwa bentuk molekul, simetri, dan polaritas tidak dapat dipisahkan. Mereka juga harus belajar bahwa software hanya membantu visualisasi dan perhitungan, sedangkan penalaran konseptual tetap diperlukan.

Dalam Praktikum 5, mahasiswa harus mampu mengubah pengamatan visual menjadi analisis ilmiah. Melihat H₂O bengkok belum cukup. Mahasiswa harus menjelaskan bahwa bentuk bengkok menyebabkan vektor dipol tidak saling meniadakan. Melihat CO₂ linear belum cukup. Mahasiswa harus menjelaskan bahwa dua vektor dipol C=O sama besar dan berlawanan arah sehingga resultannya nol. Melihat BF₃ trigonal planar belum cukup. Mahasiswa harus menjelaskan bahwa tiga vektor B–F tersusun simetris 120° dan saling meniadakan.

Dengan demikian, dasar teori ini membentuk kemampuan berpikir spasial, vektorial, dan simetris secara bersamaan.

21. Transisi ke Software yang Digunakan

Subbab 8.2 telah membahas dasar teori Praktikum 5, meliputi operasi simetri, unsur simetri, kelompok titik, polaritas, momen dipol, aktivitas optik, dan hubungan simetri dengan spektrum molekul. Pembahasan ini menunjukkan bahwa simetri bukan hanya konsep bentuk, tetapi alat ilmiah untuk memahami sifat molekul.

Subbab berikutnya akan membahas software yang digunakan dalam Praktikum 5. ChemCompute, Avogadro, Jmol, symmetry tools, ORCA, Gaussian, dan Python akan dijelaskan berdasarkan perannya masing-masing. Software tersebut digunakan untuk membangun struktur molekul,

mengoptimasi geometri, membaca momen dipol, mengidentifikasi simetri, memvisualisasikan molekul, serta menganalisis vektor dipol secara mandiri.

8.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 5 dipilih untuk mendukung tiga kegiatan utama: **membangun dan memvisualisasikan struktur molekul, mengidentifikasi simetri serta kelompok titik, dan menghitung atau menganalisis momen dipol.** Ketiga kegiatan tersebut saling berhubungan. Mahasiswa tidak dapat menentukan kelompok titik secara baik jika struktur molekul tidak benar. Mahasiswa juga tidak dapat menjelaskan polaritas secara ilmiah jika hanya melihat nilai momen dipol tanpa memahami geometri dan simetri molekul. Karena itu, software dalam subbab ini harus dipahami sebagai bagian dari alur kerja praktikum, bukan sebagai daftar alat yang berdiri sendiri.

Software yang digunakan dalam Praktikum 5 adalah:

1. **ChemCompute**
2. **Avogadro**
3. **Jmol**
4. **Symmetry tools**
5. **ORCA**
6. **Gaussian**
7. **Python**

Setiap software memiliki peran berbeda. ChemCompute berperan sebagai platform web untuk menjalankan optimasi geometri dan memperoleh momen dipol melalui paket komputasi yang tersedia. Avogadro digunakan untuk membangun dan memeriksa struktur molekul. Jmol digunakan untuk visualisasi tiga dimensi dan pengamatan bentuk molekul. Symmetry tools digunakan untuk membantu mengenali unsur simetri dan kelompok titik. ORCA dan Gaussian digunakan sebagai software struktur elektronik untuk optimasi geometri, perhitungan momen dipol, serta validasi hasil. Python digunakan untuk jalur mandiri, yaitu membaca koordinat, menghitung pusat massa, memperkirakan vektor dipol dari muatan parsial, mengklasifikasikan polaritas, menyusun tabel, membuat grafik, dan menyimpan hasil dalam CSV.

Dalam konteks literatur kimia komputasi, penggunaan beberapa software dalam satu alur kerja adalah hal yang umum. Buku-buku seperti karya Cramer, Jensen, Leach, Lewars, Atkins dan Friedman, serta Young menekankan bahwa kimia komputasi tidak hanya terdiri atas satu program, tetapi melibatkan proses penyusunan struktur, pemilihan metode, perhitungan, visualisasi, analisis data, dan interpretasi kimia. Dengan demikian, Praktikum 5 melatih mahasiswa memahami ekosistem kerja komputasi secara lebih utuh.

1. Prinsip Pemilihan Software pada Praktikum 5

Pemilihan software pada Praktikum 5 didasarkan pada kebutuhan konseptual dan teknis. Praktikum ini tidak hanya membutuhkan software perhitungan, tetapi juga software visualisasi dan analisis. Simetri molekul adalah konsep ruang tiga dimensi. Momen dipol adalah besaran vektor. Karena itu, mahasiswa harus dapat melihat molekul, memutar struktur, mengamati bidang simetri, memperkirakan arah vektor dipol, lalu membandingkannya dengan hasil perhitungan.

Kebutuhan utama Praktikum 5 dapat diringkas sebagai berikut:

Kebutuhan Praktikum	Software yang Relevan
Membuat struktur molekul	Avogadro
Memvisualisasikan molekul 3D	Avogadro, Jmol
Mengidentifikasi unsur simetri	Jmol, symmetry tools, analisis manual
Menentukan kelompok titik	Symmetry tools, analisis manual
Optimasi geometri	ChemCompute, ORCA, Gaussian
Menghitung momen dipol	ChemCompute, ORCA, Gaussian
Mengolah koordinat dan muatan parsial	Python
Memvisualisasikan vektor dipol	Python
Membuat tabel dan grafik	Python

Tabel tersebut menunjukkan bahwa tidak ada satu software yang ideal untuk seluruh tahap. Avogadro sangat baik untuk membangun struktur, tetapi bukan alat utama untuk perhitungan kuantum tingkat lanjut. ChemCompute memudahkan akses perhitungan, tetapi mahasiswa tetap harus memahami software atau metode di baliknya. ORCA dan Gaussian kuat untuk perhitungan, tetapi memerlukan pemahaman input-output. Python sangat fleksibel untuk analisis data, tetapi tidak menggantikan perhitungan struktur elektronik.

Dengan demikian, prinsip utama dalam penggunaan software Praktikum 5 adalah:

```
struktur benar
→ simetri dapat dianalisis

geometri teroptimasi
→ momen dipol lebih layak ditafsirkan

visualisasi jelas
→ unsur simetri lebih mudah dikenali

data tertib
→ analisis Python dapat direproduksi
```

2. ChemCompute sebagai Platform Web Perhitungan

ChemCompute digunakan sebagai jalur praktis untuk mahasiswa yang belum memiliki akses instalasi lokal ORCA, Gaussian, atau software komputasi lain. Dalam Praktikum 5, ChemCompute

dapat digunakan untuk menjalankan optimasi geometri molekul model dan memperoleh data momen dipol dari output perhitungan.

Peran ChemCompute dalam Praktikum 5 meliputi:

1. Menyediakan akses berbasis web untuk menjalankan perhitungan.
2. Memudahkan mahasiswa melakukan optimasi geometri tanpa instalasi lokal.
3. Memungkinkan pengambilan data momen dipol dari output.
4. Menjadi jalur awal untuk mahasiswa pemula.
5. Mengurangi hambatan teknis dalam kelas besar.

Namun, ChemCompute harus dipahami sebagai **platform**, bukan metode kimia kuantum. Jika mahasiswa menulis “momen dipol dihitung dengan ChemCompute”, pernyataan tersebut belum lengkap. Pernyataan yang lebih tepat adalah:

Optimasi geometri dan perhitungan momen dipol dilakukan melalui ChemCompute menggunakan paket komputasi yang tersedia, dengan metode dan basis set yang dicatat dalam output.

Jika ChemCompute menggunakan GAMESS, Gaussian, atau paket lain di belakangnya, nama paket tersebut harus disebut. Jika metode yang digunakan adalah Hartree–Fock, DFT, atau semiempiris, metode tersebut juga harus ditulis. Dalam laporan praktikum, informasi minimum yang perlu dicatat adalah:

Informasi	Contoh
Platform	ChemCompute
Software komputasi	GAMESS atau paket lain yang tersedia
Metode	DFT, Hartree–Fock, atau semiempiris
Fungsional	B3LYP, PBE, atau lainnya jika DFT
Basis set	6-31G(d), STO-3G, def2-SVP, atau lainnya
Molekul	H ₂ O, NH ₃ , BF ₃ , CH ₄ , CO ₂ , C ₂ H ₄ , benzena
Output utama	Geometri teroptimasi dan momen dipol

ChemCompute cocok untuk Praktikum 5 karena molekul model yang digunakan relatif kecil. H₂O, NH₃, BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena dapat dihitung dengan metode dasar dalam waktu relatif terjangkau. Mahasiswa dapat berfokus pada interpretasi simetri dan momen dipol, bukan pada kesulitan instalasi.

Keterbatasan ChemCompute adalah ketergantungan pada koneksi internet, ketersediaan server, batasan pilihan metode, dan tampilan output yang dapat berbeda bergantung paket komputasi yang digunakan. Oleh karena itu, mahasiswa harus menyimpan output asli agar data dapat diverifikasi kembali.

3. Avogadro sebagai Editor dan Visualizer Struktur Molekul

Avogadro digunakan untuk membuat struktur molekul awal, menambahkan atom hidrogen, memeriksa bentuk molekul, melakukan pembersihan geometri awal, dan menyimpan koordinat. Dalam Praktikum 5, Avogadro sangat penting karena analisis simetri sangat bergantung pada struktur molekul yang benar. Jika struktur awal salah, kelompok titik dan momen dipol yang diperoleh dapat salah pula.

Peran Avogadro dalam Praktikum 5 adalah:

1. Menggambar struktur H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena.
2. Menambahkan atom hidrogen secara lengkap.
3. Memeriksa bentuk awal molekul.
4. Mengatur struktur agar mendekati geometri ideal.
5. Menyimpan koordinat dalam format XYZ atau format lain.
6. Memvisualisasikan bentuk molekul secara tiga dimensi.
7. Membantu mahasiswa melihat arah ikatan dan kemungkinan unsur simetri.

Contoh penggunaan Avogadro untuk H_2O :

```
buat atom O
→ tambahkan dua atom H
→ bentuk molekul bengkok
→ lakukan clean geometry
→ simpan sebagai h2o_awal.xyz
```

Contoh penggunaan Avogadro untuk CO_2 :

```
buat atom C di tengah
→ tambahkan dua atom O di sisi berlawanan
→ pastikan struktur linear
→ simpan sebagai co2_awal.xyz
```

Avogadro juga berguna untuk melihat perbedaan bentuk molekul. H_2O tampak bengkok, CO_2 tampak linear, NH_3 tampak piramidal, BF_3 tampak trigonal planar, dan CH_4 tampak tetrahedral. Pengamatan visual ini membantu mahasiswa memahami mengapa polaritas molekul berbeda.

Namun, Avogadro tidak boleh digunakan tanpa validasi. Struktur yang tampak benar secara visual belum tentu memiliki koordinat yang ideal. Untuk analisis momen dipol, struktur sebaiknya dioptimasi dengan metode komputasi. Avogadro membantu membuat struktur awal, tetapi hasil akhir sebaiknya diperiksa melalui output optimasi geometri.

4. Jmol sebagai Viewer Molekul Tiga Dimensi

Jmol digunakan sebagai viewer molekul tiga dimensi. Dalam Praktikum 5, Jmol membantu mahasiswa memutar molekul, melihat bentuk ruang, memeriksa planaritas, melihat sumbu atau

bidang imajiner, dan memahami hubungan antara geometri dengan polaritas. Jmol sangat berguna karena simetri molekul sering sulit dipahami jika hanya dilihat dari gambar dua dimensi.

Peran Jmol dalam Praktikum 5 meliputi:

1. Menampilkan molekul dalam tampilan tiga dimensi.
2. Membantu mahasiswa memutar struktur dari berbagai arah.
3. Membantu melihat apakah molekul linear, planar, bengkok, piramidal, atau tetrahedral.
4. Membantu membandingkan bentuk molekul.
5. Mendukung pembelajaran visual tentang simetri.
6. Membantu menyiapkan gambar struktur untuk laporan.

Jmol dapat digunakan untuk memperlihatkan perbedaan H_2O dan CO_2 . Jika H_2O diputar, mahasiswa dapat melihat bahwa dua ikatan O–H membentuk sudut dan tidak tersusun linear. Jika CO_2 diputar, mahasiswa melihat susunan $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ yang linear. Visualisasi ini penting karena perbedaan polaritas H_2O dan CO_2 berasal dari perbedaan geometri.

Jmol juga dapat membantu membedakan BF_3 dan NH_3 . Dari tampilan dua dimensi, keduanya sama-sama memiliki tiga atom di sekitar atom pusat. Namun, dalam tiga dimensi, BF_3 trigonal planar, sedangkan NH_3 piramidal trigonal. Perbedaan inilah yang menyebabkan BF_3 nonpolar dan NH_3 polar.

Dalam laporan praktikum, gambar dari Jmol dapat digunakan sebagai pendukung penjelasan simetri. Namun, gambar harus diberi keterangan yang jelas, misalnya:

Gambar struktur NH_3 menunjukkan bentuk piramidal trigonal.
Bentuk ini menyebabkan resultan vektor dipol N–H tidak nol.

Dengan demikian, visualisasi bukan hiasan, tetapi bagian dari argumen ilmiah.

5. Symmetry Tools untuk Identifikasi Unsur Simetri dan Kelompok Titik

Symmetry tools digunakan untuk membantu mahasiswa mengidentifikasi unsur simetri dan kelompok titik molekul. Istilah “symmetry tools” dalam praktikum ini dapat mencakup perangkat lunak atau modul yang mampu menganalisis simetri molekul, baik berbasis web, plugin, maupun program khusus. Perannya adalah membantu memeriksa apakah hasil identifikasi manual mahasiswa konsisten dengan analisis komputasional.

Peran symmetry tools dalam Praktikum 5 meliputi:

1. Membantu mengenali sumbu rotasi.
2. Membantu mengenali bidang cermin.
3. Membantu mengenali pusat inversi.
4. Membantu menentukan kelompok titik.

5. Membantu membandingkan struktur ideal dan struktur hasil optimasi.
6. Membantu menguji apakah molekul mendekati simetri tertentu.

Namun, symmetry tools harus digunakan secara kritis. Hasil software dapat bergantung pada toleransi geometri. Jika struktur sedikit terdistorsi, software mungkin memberi kelompok titik lebih rendah daripada struktur ideal. Sebaliknya, jika toleransi terlalu longgar, software dapat menganggap struktur lebih simetris daripada sebenarnya.

Contoh:

BF_3 ideal memiliki kelompok titik D_{3h} .
Jika koordinat hasil optimasi sedikit tidak simetris,
symmetry tools mungkin membaca simetri yang lebih rendah.

Dalam laporan, mahasiswa dapat menulis:

Berdasarkan analisis manual, BF_3 memiliki kelompok titik D_{3h} karena berbentuk trigonal planar dan memiliki sumbu C_3 serta bidang horizontal. Hasil symmetry tools digunakan sebagai verifikasi, tetapi interpretasi tetap didasarkan pada struktur dan unsur simetri yang diamati.

Pernyataan seperti ini menunjukkan bahwa mahasiswa tidak menyerahkan seluruh penalaran kepada software. Software membantu, tetapi analisis tetap harus dapat dijelaskan.

6. ORCA sebagai Software Perhitungan Struktur Elektronik

ORCA digunakan sebagai software struktur elektronik untuk optimasi geometri dan perhitungan momen dipol. Dalam Praktikum 5, ORCA dapat menjadi jalur lokal atau server bagi mahasiswa yang sudah memiliki kemampuan menjalankan input-output berbasis file. ORCA relevan karena mampu melakukan perhitungan Hartree–Fock, DFT, dan metode lain yang dapat menghasilkan geometri teroptimasi serta momen dipol.

Peran ORCA dalam Praktikum 5:

1. Mengoptimasi geometri molekul.
2. Menghitung momen dipol.
3. Menghasilkan output yang dapat dianalisis.
4. Menyediakan data koordinat hasil optimasi.
5. Menjadi pembanding terhadap hasil ChemCompute.
6. Memberi pengalaman menggunakan input file kimia komputasi.

Contoh input sederhana ORCA untuk H_2O :

```
! B3LYP 6-31G(d) Opt
* xyz 0 1
```



```

O      0.000000      0.000000      0.000000
H      0.758000      0.000000      0.504000
H     -0.758000      0.000000      0.504000
*
```

Dalam contoh tersebut, B3LYP adalah fungsional DFT, 6-31G(d) adalah basis set, dan Opt menunjukkan optimasi geometri. Baris xyz 0 1 menunjukkan koordinat Cartesian, muatan total 0, dan multiplicity 1.

Setelah job selesai, mahasiswa harus mencari bagian output yang memuat momen dipol. Nilai momen dipol biasanya diberikan dalam Debye atau dalam komponen vektor tertentu, bergantung format output. Mahasiswa harus mencatat:

Data	Keterangan
Komponen μ_x	Komponen momen dipol arah x
Komponen μ_y	Komponen momen dipol arah y
Komponen μ_z	Komponen momen dipol arah z
Total μ	Besar momen dipol total
Satuan	Umumnya Debye
Status optimasi	Konvergen atau tidak

Kelebihan ORCA adalah fleksibilitas dan kekuatan perhitungan DFT. Keterbatasannya adalah kebutuhan instalasi, penggunaan terminal, serta kemampuan membaca output yang relatif teknis. Oleh karena itu, ORCA cocok untuk mahasiswa yang telah terbiasa dengan praktikum komputasi sebelumnya.

7. Gaussian sebagai Software Perhitungan Geometri dan Momen Dipol

Gaussian dapat digunakan untuk optimasi geometri dan perhitungan momen dipol jika institusi memiliki lisensi resmi. Dalam Praktikum 5, Gaussian berperan sebagai salah satu software struktur elektronik yang dapat menghasilkan output geometri, energi, distribusi muatan, dan momen dipol. Gaussian banyak digunakan dalam literatur kimia komputasi, sehingga mahasiswa perlu mengenal perannya, meskipun penggunaannya harus tunduk pada lisensi.

Peran Gaussian dalam Praktikum 5:

1. Mengoptimasi geometri molekul.
2. Menghitung momen dipol.
3. Menyediakan output komponen momen dipol.
4. Mendukung visualisasi jika dipasangkan dengan software pendukung.
5. Menjadi pembanding hasil ORCA atau ChemCompute.
6. Memberi pengalaman membaca output software komersial.

Contoh input Gaussian untuk CO₂:

```
%chk=co2.chk
# B3LYP/6-31G(d) Opt

CO2 optimasi geometri dan momen dipol

0 1
O -1.160000    0.000000    0.000000
C  0.000000    0.000000    0.000000
O  1.160000    0.000000    0.000000
```

Setelah perhitungan selesai, output Gaussian dapat menampilkan momen dipol dalam komponen x, y, z dan total. Untuk CO₂ ideal, total momen dipol seharusnya mendekati nol. Jika hasil tidak nol tetapi sangat kecil, mahasiswa harus menilai apakah itu akibat distorsi geometri, orientasi koordinat, toleransi numerik, atau kesalahan input.

Gaussian memiliki kelebihan pada dokumentasi luas dan integrasi dengan ekosistem visualisasi. Namun, karena merupakan software berlisensi, penggunaannya harus dilakukan secara sah. Etika penggunaan software adalah bagian dari integritas akademik. Mahasiswa tidak boleh menggunakan software komersial tanpa lisensi resmi.

8. Python sebagai Alat Analisis Vektor Dipol dan Data Praktikum

Python digunakan sebagai jalur mandiri dalam Praktikum 5. Jika ChemCompute, ORCA, atau Gaussian menghasilkan momen dipol dari perhitungan struktur elektronik, Python digunakan untuk memahami konsep momen dipol secara lebih eksplisit melalui koordinat, muatan parsial, pusat massa, vektor, klasifikasi polaritas, grafik, dan CSV.

Peran Python dalam Praktikum 5 meliputi:

1. Membaca atau memasukkan koordinat molekul.
2. Menghitung pusat massa.
3. Memasukkan muatan parsial sederhana.
4. Menghitung vektor dipol dari pendekatan $\sum q_i \mathbf{r}_i$.
5. Menghitung besar momen dipol.
6. Menentukan polar atau nonpolar berdasarkan ambang tertentu.
7. Memvisualisasikan vektor dipol.
8. Menyusun tabel molekul, kelompok titik, dan momen dipol.
9. Membuat grafik batang momen dipol.
10. Menyimpan file CSV hasil analisis.

Python membantu mahasiswa memahami bahwa momen dipol adalah vektor. Dalam perhitungan software kuantum, mahasiswa sering hanya melihat angka total momen dipol. Dengan Python, mahasiswa dapat melihat bagaimana kontribusi muatan dan posisi menghasilkan vektor total.

Contoh konsep yang digunakan Python:

$$\mu_x = \sum q_i x_i$$

$$\mu_y = \sum q_i y_i$$

$$\mu_z = \sum q_i z_i$$

$$\mu_{\text{total}} = \sqrt{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)}$$

Dalam praktikum dasar, pendekatan ini digunakan sebagai model konseptual. Nilai yang dihitung dari muatan parsial sederhana belum tentu sama dengan hasil perhitungan DFT karena momen dipol kuantum berasal dari distribusi elektron kontinu, bukan hanya muatan titik. Namun, pendekatan Python tetap berguna untuk mengajarkan logika vektorial.

9. Perbandingan Peran Semua Software

Peran semua software dalam Praktikum 5 dapat diringkas sebagai berikut:

Software	Peran Utama	Kelebihan	Keterbatasan
ChemCompute	Platform web perhitungan	Mudah diakses, cocok untuk pemula	Bergantung internet dan pilihan paket
Avogadro	Editor struktur molekul	Mudah membuat struktur dan koordinat	Bukan alat utama perhitungan kuantum
Jmol	Viewer 3D	Baik untuk visualisasi ruang	Tidak otomatis menentukan semua sifat
Symmetry tools	Analisis simetri	Membantu identifikasi kelompok titik	Sensitif terhadap toleransi geometri
ORCA	Perhitungan struktur elektronik	Kuat, fleksibel untuk DFT	Perlu instalasi dan terminal
Gaussian	Perhitungan struktur elektronik	Luas digunakan, output lengkap	Memerlukan lisensi resmi
Python	Analisis data dan vektor	Reprodusibel, fleksibel	Bergantung kualitas data input

Tabel ini memperlihatkan bahwa software harus digunakan sesuai perannya. Kesalahan umum mahasiswa adalah mencampur fungsi software. Misalnya, menganggap Avogadro sebagai sumber utama momen dipol kuantum, atau menganggap Python menghitung momen dipol DFT secara langsung. Pernyataan yang lebih tepat adalah:

Avogadro digunakan untuk membuat struktur.

ORCA atau Gaussian digunakan untuk menghitung momen dipol kuantum.

Python digunakan untuk menganalisis data dan memvisualisasikan vektor dipol berdasarkan input yang diberikan.

Pemahaman peran ini penting agar laporan praktikum tidak keliru secara metodologis.

10. Workflow Praktikum yang Direkomendasikan

Workflow Praktikum 5 dapat disusun dalam dua jalur utama: jalur ChemCompute dan jalur Python mandiri. Jalur ChemCompute menghasilkan geometri dan momen dipol dari paket komputasi. Jalur Python membantu mahasiswa memahami dan mengolah data secara eksplisit.

a. Jalur ChemCompute

Avogadro
 → membuat struktur awal molekul
 → ChemCompute
 → optimasi geometri
 → output momen dipol
 → tabel molekul dan momen dipol
 → analisis polar/nonpolar

Jalur ini cocok untuk mahasiswa pemula karena tidak memerlukan instalasi lokal yang rumit.

b. Jalur ORCA atau Gaussian

Avogadro
 → file XYZ
 → ORCA atau Gaussian
 → optimasi geometri
 → output momen dipol
 → Jmol atau Avogadro untuk visualisasi
 → tabel dan laporan

Jalur ini cocok untuk mahasiswa yang sudah terbiasa dengan file input-output.

c. Jalur Python Mandiri

koordinat molekul
 → input muatan parsial
 → hitung pusat massa
 → hitung vektor dipol
 → klasifikasi polar/nonpolar
 → visualisasi vektor dipol
 → CSV dan grafik batang

Jalur Python tidak menggantikan perhitungan kuantum, tetapi memperkuat pemahaman konsep vektor dipol.

Workflow ideal dalam Praktikum 5 adalah menggabungkan ketiganya secara proporsional. Mahasiswa membangun struktur dengan Avogadro, menghitung momen dipol melalui ChemCompute atau software struktur elektronik, memvisualisasikan molekul dengan Jmol, memeriksa simetri dengan symmetry tools, dan menganalisis data dengan Python.

11. Data Minimum yang Harus Dihasilkan

Setelah menggunakan software, mahasiswa harus menghasilkan data minimum berikut:

Data	Keterangan
Nama molekul	H ₂ O, NH ₃ , BF ₃ , CH ₄ , CO ₂ , C ₂ H ₄ , benzena
Struktur molekul	Struktur awal dan/atau hasil optimasi
Kelompok titik	Ditentukan manual dan/atau dibantu symmetry tools
Momen dipol	Nilai total dalam Debye
Komponen dipol	μ_x , μ_y , μ_z jika tersedia
Klasifikasi polaritas	Polar atau nonpolar
Software perhitungan	ChemCompute, ORCA, Gaussian, atau lainnya
Metode	DFT, HF, semiempiris, atau metode lain
Basis set	Dicatat jika digunakan
Status optimasi	Konvergen atau tidak
File output	Disimpan sebagai bukti
File CSV	Hasil analisis Python

Data ini penting karena Praktikum 5 menuntut integrasi antara konsep simetri dan hasil numerik. Tanpa kelompok titik, analisis momen dipol menjadi kurang konseptual. Tanpa momen dipol, analisis polaritas menjadi kurang berbasis data. Tanpa metode dan basis set, hasil komputasi sulit dievaluasi.

12. Contoh Format Tabel Awal

Mahasiswa dapat mulai dengan tabel awal berikut:

Molekul	Bentuk	Kelompok Titik	Momen Dipol (D)	Polar/Nonpolar	Software
H ₂ O	Bengkok	C _{2v}	...	Polar	...
NH ₃	Piramidal trigonal	C _{3v}	...	Polar	...
BF ₃	Trigonal planar	D _{3h}	...	Nonpolar	...
CH ₄	Tetrahedral	T ^d	...	Nonpolar	...
CO ₂	Linear	D _{∞h}	...	Nonpolar	...
C ₂ H ₄	Planar	D _{2h}	...	Nonpolar	...
Benzena	Planar aromatik	D _{6h}	...	Nonpolar	...

Tabel tersebut harus diisi berdasarkan hasil praktikum. Untuk molekul nonpolar, nilai momen dipol hasil perhitungan dapat sangat kecil tetapi tidak selalu persis nol karena faktor numerik. Jika nilainya mendekati nol, mahasiswa harus menuliskan bahwa hasil tersebut konsisten dengan simetri molekul.

Contoh narasi:

Nilai momen dipol CO₂ mendekati nol. Hasil ini konsisten dengan kelompok titik D_{∞h} dan struktur linear O=C=O, yang menyebabkan dua vektor dipol C=O saling meniadakan.

Narasi seperti ini menghubungkan angka dengan konsep simetri.

13. Validasi Hasil Software

Hasil software harus divalidasi sebelum digunakan dalam laporan. Validasi dilakukan untuk memastikan bahwa struktur, metode, dan output sesuai dengan tujuan praktikum.

Daftar validasi:

Aspek	Pertanyaan Validasi
Struktur	Apakah molekul dibangun dengan benar?
Hidrogen	Apakah semua atom H lengkap?
Geometri	Apakah bentuk molekul sesuai teori?
Optimasi	Apakah optimasi selesai normal?
Metode	Apakah metode tercatat jelas?
Basis set	Apakah basis set dicatat?
Momen dipol	Apakah nilai total dan komponen tersedia?
Kelompok titik	Apakah sesuai dengan struktur ideal?
Simetri	Apakah hasil symmetry tools masuk akal?
Output	Apakah file asli disimpan?

Validasi sangat penting terutama untuk molekul simetris seperti BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena. Jika struktur sedikit terdistorsi, momen dipol dapat muncul sangat kecil. Mahasiswa harus menilai apakah nilai tersebut bermakna atau hanya akibat toleransi numerik.

Contoh:

Jika momen dipol BF_3 terbaca 0,0002 D, nilai tersebut dapat dianggap mendekati nol dan konsisten dengan struktur trigonal planar simetris, selama geometri dan output perhitungan valid.

Namun, jika nilai momen dipol BF_3 besar, mahasiswa harus memeriksa ulang struktur dan perhitungan.

14. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software

Beberapa kesalahan umum dalam Praktikum 5 adalah:

Kesalahan	Dampak
Struktur molekul salah	Kelompok titik dan momen dipol salah
Tidak melakukan optimasi geometri	Momen dipol kurang layak ditafsirkan
Tidak mencatat metode dan basis set	Hasil tidak dapat dievaluasi
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Laporan metodologis tidak tepat

Menganggap nilai kecil selalu bermakna	Salah membaca toleransi numerik
Menggunakan symmetry tools tanpa analisis manual	Pemahaman konsep lemah
Menganggap ikatan polar selalu berarti molekul polar	Miskonsepsi polaritas
Tidak menyimpan output asli	Data tidak dapat diverifikasi
Salah membaca satuan momen dipol	Nilai tidak konsisten
Mengira Python menggantikan DFT	Kesalahan metodologis

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari melalui prosedur yang tertib. Mahasiswa harus membangun struktur dengan benar, memvalidasi output, mencatat metode, dan menghubungkan hasil dengan teori simetri.

15. Etika dan Reprodusibilitas Penggunaan Software

Etika penggunaan software adalah bagian penting dari praktikum kimia komputasi. Software open-source dan freeware harus digunakan sesuai lisensinya. Software komersial seperti Gaussian hanya boleh digunakan jika institusi memiliki lisensi resmi. Mahasiswa tidak boleh menggunakan software bajakan atau menyalin output tanpa memahami prosesnya.

Reprodusibilitas juga harus dijaga. Setiap hasil momen dipol harus dapat ditelusuri kembali ke file input dan output. Struktur folder yang dianjurkan adalah:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol/
├── struktur_awal/
│   ├── h2o_awal.xyz
│   ├── nh3_awal.xyz
│   ├── bf3_awal.xyz
│   ├── ch4_awal.xyz
│   ├── co2_awal.xyz
│   ├── c2h4_awal.xyz
│   └── benzena_awal.xyz
├── output_komputasi/
│   ├── h2o_output.log
│   ├── nh3_output.log
│   ├── bf3_output.log
│   ├── ch4_output.log
│   ├── co2_output.log
│   ├── c2h4_output.log
│   └── benzena_output.log
├── data/
│   └── data_simetri_momen_dipol.csv
├── kode/
│   └── praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
└── output_praktikum_05/
    └── tabel_simetri_momen_dipol.csv
```

```

├── grafik_momen_dipol.png
├── visualisasi_vektor_dipol.png
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_05.docx

```

Struktur folder seperti ini membuat alur kerja lebih tertib. Dosen dapat memeriksa output asli, data, kode Python, grafik, dan laporan.

16. Implikasi Pedagogis Penggunaan Software

Penggunaan software dalam Praktikum 5 memiliki implikasi pedagogis yang kuat. Mahasiswa belajar bahwa konsep abstrak seperti simetri dan momen dipol dapat divisualisasikan dan dihitung. Mereka tidak hanya menghafal kelompok titik, tetapi melihat molekul dalam ruang, menjalankan perhitungan, memeriksa vektor, dan menghubungkan hasil dengan teori.

Penggunaan Avogadro dan Jmol membantu keterampilan spasial. Penggunaan ChemCompute, ORCA, atau Gaussian membantu keterampilan membaca output komputasi. Penggunaan symmetry tools membantu validasi simetri. Penggunaan Python membantu literasi data dan pemahaman vektor. Dengan demikian, Praktikum 5 melatih beberapa kemampuan sekaligus:

1. Kemampuan visual-spasial.
2. Kemampuan membaca simetri.
3. Kemampuan memahami polaritas.
4. Kemampuan menjalankan perhitungan komputasi.
5. Kemampuan mengolah data.
6. Kemampuan menulis analisis ilmiah.
7. Kemampuan menjaga reproduisibilitas.

Ini adalah alasan software dalam Praktikum 5 tidak boleh diperlakukan sebagai alat teknis belaka. Software menjadi bagian dari strategi pembelajaran kimia kuantum.

17. Transisi ke Molekul Model

Subbab 8.3 telah membahas software yang digunakan dalam Praktikum 5, yaitu ChemCompute, Avogadro, Jmol, symmetry tools, ORCA, Gaussian, dan Python. Setiap software memiliki peran yang berbeda tetapi saling melengkapi dalam membangun struktur, mengoptimasi geometri, mengidentifikasi simetri, menghitung momen dipol, memvisualisasikan molekul, dan menganalisis data.

Subbab berikutnya akan membahas molekul model yang digunakan, yaitu H₂O, NH₃, BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena. Molekul-molekul ini dipilih karena memberikan contoh yang jelas tentang hubungan antara bentuk molekul, kelompok titik, simetri, polaritas, dan momen dipol.

Dengan memahami software terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap menjalankan praktikum secara sistematis pada setiap molekul model.

8.4 Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 5 dipilih untuk memperlihatkan hubungan antara **bentuk molekul, unsur simetri, kelompok titik, polaritas, dan momen dipol**. Pemilihan molekul model tidak boleh dianggap sebagai daftar contoh acak. Setiap molekul memiliki fungsi pedagogis tertentu. H_2O menunjukkan bahwa bentuk bengkok menghasilkan momen dipol tidak nol. NH_3 menunjukkan bahwa bentuk piramidal trigonal menyebabkan resultan dipol tidak saling meniadakan. BF_3 menunjukkan bahwa molekul dengan ikatan polar dapat tetap nonpolar jika vektor dipol tersusun simetris. CH_4 menunjukkan simetri tetrahedral yang tinggi. CO_2 menunjukkan bahwa molekul linear dengan dua ikatan polar dapat nonpolar karena resultan vektornya nol. C_2H_4 menunjukkan simetri molekul planar dengan pusat inversi. Benzena menunjukkan simetri tinggi pada sistem aromatik planar.

Molekul model Praktikum 5 adalah:

1. **H_2O**
2. **NH_3**
3. **BF_3**
4. **CH_4**
5. **CO_2**
6. **C_2H_4**
7. **Benzena**

Ketujuh molekul tersebut dipilih karena relatif sederhana, mudah divisualisasikan, mudah dihitung dengan software kimia komputasi dasar, dan sangat kaya secara konseptual. Dalam literatur kimia fisik, kimia anorganik, dan teori grup molekul, molekul-molekul seperti H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , etilena, dan benzena sering digunakan sebagai contoh standar untuk mengajarkan hubungan antara simetri dan sifat molekul. Buku-buku seperti karya Cotton, Bishop, Carter, Atkins dan Friedman, Levine, Harris dan Bertolucci, serta Jensen menjadikan molekul sederhana sebagai pintu masuk untuk memahami teori grup, momen dipol, dan spektroskopi.

Dalam Praktikum 5, mahasiswa tidak hanya diminta menghafal bahwa H_2O polar, CO_2 nonpolar, atau BF_3 nonpolar. Mahasiswa harus mampu menjelaskan **mengapa** hasil tersebut muncul. Penjelasan harus didasarkan pada struktur, unsur simetri, kelompok titik, arah vektor dipol, dan resultan momen dipol. Dengan demikian, molekul model berfungsi sebagai laboratorium konseptual untuk memahami bahwa polaritas adalah akibat dari geometri dan distribusi muatan, bukan sekadar akibat adanya ikatan polar.

1. Prinsip Pemilihan Molekul Model

Pemilihan molekul model dalam Praktikum 5 didasarkan pada lima prinsip utama.

Pertama, molekul harus **sederhana secara struktur** agar mahasiswa dapat melihat bentuknya dengan jelas. H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena memiliki struktur yang mudah dikenali. Mahasiswa dapat menggambarinya, memvisualisasikannya dengan Avogadro atau Jmol, dan menghubungkannya dengan bentuk molekul yang telah dipelajari pada kimia dasar.

Kedua, molekul harus **mewakili variasi kelompok titik**. Praktikum 5 tidak cukup hanya memakai molekul yang semuanya polar atau semuanya nonpolar. Molekul harus bervariasi agar mahasiswa dapat membandingkan kelompok titik C_{2v} , C_{3v} , D_{3h} , T_d , $\text{D}_{\infty h}$, D_{2h} , dan D_{6h} .

Ketiga, molekul harus **menunjukkan hubungan yang jelas antara simetri dan momen dipol**. H_2O dan NH_3 mewakili molekul dengan momen dipol tidak nol. BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena mewakili molekul yang secara ideal memiliki momen dipol nol karena simetrinya menyebabkan vektor dipol saling meniadakan.

Keempat, molekul harus **mudah dihitung secara komputasi**. Semua molekul model berukuran kecil hingga sedang. Karena itu, optimasi geometri dan perhitungan momen dipol dapat dilakukan dengan ChemCompute, ORCA, Gaussian, atau software lain dalam waktu yang relatif terjangkau.

Kelima, molekul harus **relevan secara pedagogis**. Setiap molekul berhubungan dengan topik penting dalam kimia: air dengan polaritas dan ikatan hidrogen, amonia dengan geometri piramidal, BF_3 dengan trigonal planar, metana dengan tetrahedral, karbon dioksida dengan linearitas, etilena dengan planaritas dan ikatan π , serta benzena dengan aromaticitas dan simetri tinggi.

Dengan prinsip tersebut, molekul model tidak hanya menjadi objek hitungan, tetapi menjadi sarana membangun pemahaman simetri secara bertahap.

2. Ringkasan Molekul Model Praktikum 5

Ringkasan awal molekul model dapat disusun sebagai berikut:

Molekul	Bentuk Molekul	Kelompok Titik Ideal	Polaritas Ideal	Fokus Pembelajaran
H_2O	Bengkok	C_{2v}	Polar	Bentuk bengkok dan momen dipol tidak nol
NH_3	Piramidal trigonal	C_{3v}	Polar	Pasangan elektron bebas dan resultan dipol
BF_3	Trigonal planar	D_{3h}	Nonpolar	Ikatan polar tetapi vektor saling meniadakan
CH_4	Tetrahedral	T_d	Nonpolar	Simetri tetrahedral tinggi
CO_2	Linear	$\text{D}_{\infty h}$	Nonpolar	Ikatan polar tetapi struktur linear simetris
C_2H_4	Planar	D_{2h}	Nonpolar	Planaritas, pusat inversi, dan ikatan π

Benzena	Planar aromatik	D _{6h}	Nonpolar	Simetri tinggi cincin aromatik

Tabel tersebut menjadi peta awal bagi mahasiswa. Namun, tabel tidak boleh berhenti sebagai hafalan. Setiap baris harus dijelaskan melalui analisis vektor dipol dan unsur simetri. Misalnya, CO₂ nonpolar bukan karena ikatan C=O tidak polar, tetapi karena dua vektor dipol C=O tersusun berlawanan dan saling meniadakan. BF₃ nonpolar bukan karena ikatan B–F tidak polar, tetapi karena tiga vektor dipol B–F tersusun simetris dalam bidang trigonal planar.

3. H₂O sebagai Model Molekul Bengkok dan Polar

H₂O atau air merupakan molekul model pertama karena sangat dikenal, tetapi tetap memiliki kedalaman konseptual yang besar. Molekul air memiliki bentuk bengkok. Atom O berada di pusat, sedangkan dua atom H membentuk sudut H–O–H. Bentuk bengkok ini muncul karena adanya dua pasangan elektron bebas pada atom O yang memengaruhi geometri molekul.

Dalam analisis simetri, H₂O termasuk kelompok titik C_{2v}. Molekul ini memiliki sumbu rotasi C₂ dan bidang-bidang simetri vertikal. Meskipun memiliki unsur simetri, simetri H₂O tidak cukup tinggi untuk meniadakan resultan momen dipol. Dua ikatan O–H bersifat polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada hidrogen. Karena bentuk molekul bengkok, dua vektor dipol O–H tidak saling berlawanan secara linear. Akibatnya, resultan vektor dipol tidak nol.

Secara konseptual:

H₂O
 → bentuk bengkok
 → ikatan O–H polar
 → vektor dipol tidak saling meniadakan
 → momen dipol total tidak nol
 → molekul polar

H₂O sangat penting dalam pembelajaran karena membongkar anggapan sederhana bahwa polaritas hanya ditentukan oleh jenis ikatan. H₂O menunjukkan bahwa geometri molekul sangat menentukan. Jika H₂O berbentuk linear, vektor O–H dapat saling meniadakan. Namun, karena bentuknya bengkok, resultan dipol tetap ada.

Dalam praktikum, mahasiswa harus mencatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	H ₂ O
Bentuk	Bengkok
Kelompok titik	C _{2v}
Polaritas	Polar
Penyebab utama	Vektor dipol O–H tidak saling meniadakan
Fokus analisis	Hubungan bentuk bengkok dengan momen dipol

Contoh analisis laporan:

H₂O memiliki bentuk bengkok dan termasuk kelompok titik C_{2v}. Dua ikatan O-H bersifat polar, dan karena susunan ikatan tidak linear, vektor dipol O-H tidak saling meniadakan. Oleh karena itu, H₂O memiliki momen dipol tidak nol dan bersifat polar.

H₂O juga menjadi dasar untuk memahami mengapa air memiliki sifat fisik yang khas, seperti kemampuan melarutkan banyak zat ionik dan polar, memiliki titik didih relatif tinggi, serta membentuk ikatan hidrogen. Walaupun praktikum ini tidak membahas sifat air secara lengkap, polaritas H₂O menjadi konsep sentral dalam kimia.

4. NH₃ sebagai Model Molekul Piramidal Trigonal dan Polar

NH₃ atau amonia merupakan molekul model kedua. Molekul ini memiliki atom N sebagai atom pusat dan tiga atom H di sekelilingnya. Berdasarkan teori VSEPR, NH₃ berbentuk piramidal trigonal karena atom N memiliki satu pasangan elektron bebas. Bentuk ini berbeda dari trigonal planar karena atom N berada pada puncak piramida, sedangkan tiga atom H membentuk dasar segitiga.

Dalam analisis simetri, NH₃ termasuk kelompok titik C_{3v}. Molekul ini memiliki sumbu C₃ yang melalui atom N dan pusat segitiga H₃, serta memiliki tiga bidang cermin vertikal. Jika molekul diputar 120° terhadap sumbu C₃, posisi tiga atom H saling bertukar, tetapi molekul tetap ekuivalen.

NH₃ bersifat polar karena vektor dipol N-H tidak saling meniadakan. Selain itu, pasangan elektron bebas pada N berperan dalam membentuk distribusi elektron yang tidak simetris sempurna seperti pada molekul trigonal planar. Resultan momen dipol mengarah sepanjang sumbu C₃.

Secara konseptual:

NH₃
 → bentuk piramidal trigonal
 → kelompok titik C_{3v}
 → ikatan N-H polar
 → resultan dipol tidak nol
 → molekul polar

NH₃ penting karena sering dibandingkan dengan BF₃. Keduanya memiliki tiga atom di sekitar atom pusat, tetapi bentuk dan polaritasnya berbeda. NH₃ piramidal trigonal dan polar, sedangkan BF₃ trigonal planar dan nonpolar. Perbandingan ini menunjukkan bahwa jumlah atom di sekitar atom pusat tidak cukup untuk menentukan polaritas; bentuk tiga dimensi harus diperhatikan.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	NH ₃

Bentuk	Piramidal trigonal
Kelompok titik	C_{3v}
Polaritas	Polar
Penyebab utama	Resultan vektor dipol N–H tidak nol
Fokus analisis	Pengaruh pasangan elektron bebas terhadap bentuk dan polaritas

Contoh analisis laporan:

NH_3 memiliki bentuk piramidal trigonal karena adanya pasangan elektron bebas pada atom N. Molekul ini termasuk kelompok titik C_{3v} . Tiga vektor dipol N–H tidak saling meniadakan secara sempurna, sehingga NH_3 memiliki momen dipol total tidak nol dan bersifat polar.

NH_3 juga relevan dalam kimia koordinasi karena pasangan elektron bebas pada nitrogen menjadikan amonia ligan donor elektron. Walaupun fokus Praktikum 5 adalah simetri dan momen dipol, hubungan antara bentuk, pasangan elektron bebas, dan sifat donor dapat disebut sebagai implikasi kimia yang lebih luas.

5. BF_3 sebagai Model Trigonal Planar Nonpolar

BF_3 atau boron trifluorida merupakan molekul model penting untuk memahami bahwa molekul dengan ikatan polar dapat bersifat nonpolar. BF_3 memiliki atom B sebagai atom pusat dan tiga atom F yang tersusun dalam geometri trigonal planar. Ketiga ikatan B–F berada dalam satu bidang dengan sudut sekitar 120° .

Dalam analisis simetri, BF_3 termasuk kelompok titik **D_{3h}** . Molekul ini memiliki sumbu C_3 yang tegak lurus bidang molekul, tiga sumbu C_2 , bidang horizontal, dan bidang-bidang vertikal. Simetri BF_3 cukup tinggi sehingga resultan momen dipolnya nol.

Ikatan B–F bersifat polar karena fluor jauh lebih elektronegatif daripada boron. Namun, tiga vektor dipol B–F tersusun simetris dalam bidang trigonal planar. Jika ketiga vektor tersebut dijumlahkan, resultannya nol. Oleh karena itu, BF_3 nonpolar.

Secara konseptual:

BF_3
 → ikatan B–F polar
 → bentuk trigonal planar simetris
 → tiga vektor dipol berjarak 120°
 → resultan vektor nol
 → molekul nonpolar

BF_3 adalah contoh penting untuk mengoreksi miskonsepsi bahwa “molekul dengan ikatan polar pasti polar”. Ikatan B–F memang polar, tetapi molekul BF_3 secara keseluruhan nonpolar karena simetri.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	BF_3
Bentuk	Trigonal planar
Kelompok titik	D_{3h}
Polaritas	Nonpolar
Penyebab utama	Tiga vektor dipol B–F saling meniadakan
Fokus analisis	Ikatan polar tidak selalu menghasilkan molekul polar

Contoh analisis laporan:

BF_3 memiliki tiga ikatan B–F yang polar. Namun, molekul BF_3 berbentuk trigonal planar dan termasuk kelompok titik D_{3h} . Karena tiga vektor dipol B–F tersusun simetris dengan sudut 120° , resultan momen dipolnya nol. Oleh karena itu, BF_3 bersifat nonpolar.

Dalam konteks kimia, BF_3 juga dikenal sebagai asam Lewis karena atom B kekurangan elektron dan dapat menerima pasangan elektron. Ini menunjukkan bahwa nonpolaritas molekul tidak selalu berarti molekul tidak reaktif. BF_3 nonpolar secara momen dipol, tetapi tetap dapat berperan sebagai akseptor pasangan elektron dalam reaksi asam-basa Lewis. Hal ini penting agar mahasiswa tidak menyamakan polaritas dengan semua aspek reaktivitas.

6. CH_4 sebagai Model Tetrahedral Simetris

CH_4 atau metana merupakan contoh klasik molekul tetrahedral. Atom C berada di pusat, sedangkan empat atom H berada pada posisi tetrahedral. Dalam struktur ideal, keempat ikatan C–H ekuivalen dan tersusun sangat simetris.

Dalam analisis simetri, CH_4 termasuk kelompok titik T^d . Kelompok titik ini menunjukkan simetri tetrahedral yang tinggi. CH_4 memiliki banyak operasi simetri, termasuk sumbu rotasi dan bidang simetri tertentu dalam kerangka tetrahedral. Karena simetrinya tinggi, resultan momen dipol CH_4 adalah nol.

Ikatan C–H sering dianggap hanya sedikit polar karena perbedaan elektronegativitas C dan H tidak sebesar ikatan seperti O–H atau B–F. Namun, alasan utama CH_4 nonpolar bukan hanya karena ikatan C–H lemah polar, melainkan karena susunan tetrahedral yang sangat simetris menyebabkan semua kontribusi dipol saling meniadakan.

Secara konseptual:

CH_4
 → bentuk tetrahedral
 → kelompok titik T^d
 → distribusi ikatan sangat simetris

- resultan dipol nol
- molekul nonpolar

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	CH ₄
Bentuk	Tetrahedral
Kelompok titik	T ^d
Polaritas	Nonpolar
Penyebab utama	Simetri tetrahedral meniadakan vektor dipol
Fokus analisis	Hubungan simetri tinggi dengan momen dipol nol

Contoh analisis laporan:

CH₄ memiliki bentuk tetrahedral dengan kelompok titik T^d. Empat ikatan C-H tersusun secara simetris mengelilingi atom C. Karena vektor-vektor dipol ikatan saling meniadakan, momen dipol total CH₄ adalah nol dan molekul bersifat nonpolar.

CH₄ penting sebagai jembatan menuju molekul tetrahedral lain. Jika satu atom H diganti oleh atom lain, misalnya pada CH₃Cl, simetri turun dan molekul menjadi polar. Dengan demikian, CH₄ dapat menjadi acuan untuk memahami bagaimana substitusi menurunkan simetri dan mengubah momen dipol.

7. CO₂ sebagai Model Linear Simetris dan Nonpolar

CO₂ atau karbon dioksida merupakan molekul linear dengan struktur O=C=O. Molekul ini sering digunakan sebagai contoh utama bahwa ikatan polar tidak selalu menghasilkan molekul polar. Ikatan C=O bersifat polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada karbon. Namun, dua ikatan C=O tersusun linear dan berlawanan arah.

Dalam analisis simetri, CO₂ termasuk kelompok titik **D_{∞h}**. Molekul linear dengan pusat inversi seperti CO₂ memiliki simetri tinggi. Pusat inversi pada atom C menyebabkan distribusi dua atom O di kedua sisi setara. Karena itu, dua vektor dipol C=O memiliki besar sama dan arah berlawanan, sehingga resultannya nol.

Secara konseptual:

CO₂

- dua ikatan C=O polar
- struktur linear O=C=O
- dua vektor dipol sama besar dan berlawanan arah
- resultan dipol nol
- molekul nonpolar

CO₂ sangat penting untuk membandingkan dengan H₂O. Keduanya memiliki atom pusat dan dua atom terminal. Keduanya memiliki ikatan polar. Namun, H₂O bengkok dan polar, sedangkan CO₂ linear dan nonpolar. Perbedaan ini menunjukkan bahwa geometri lebih menentukan polaritas molekul daripada sekadar jumlah atom atau keberadaan ikatan polar.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	CO ₂
Bentuk	Linear
Kelompok titik	D _{∞h}
Polaritas	Nonpolar
Penyebab utama	Dua vektor C=O saling meniadakan
Fokus analisis	Perbandingan dengan H ₂ O

Contoh analisis laporan:

CO₂ memiliki dua ikatan C=O yang polar, tetapi molekul ini berbentuk linear dan termasuk kelompok titik D_{∞h}. Dua vektor dipol C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan, sehingga resultan momen dipolnya nol. Oleh karena itu, CO₂ bersifat nonpolar.

Dalam spektroskopi, CO₂ juga menarik karena meskipun molekulnya nonpolar secara permanen, beberapa mode vibrasinya dapat aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol. Ini menunjukkan bahwa momen dipol permanen dan aktivitas IR adalah konsep yang berkaitan tetapi tidak identik.

8. C₂H₄ sebagai Model Molekul Planar dengan Pusat Inversi

C₂H₄ atau etilena merupakan molekul planar dengan satu ikatan rangkap C=C. Molekul ini telah muncul pada Bab 7 sebagai model sistem π sederhana. Dalam Bab 8, etilena digunakan dari sudut pandang berbeda, yaitu sebagai model molekul planar dengan simetri tertentu dan momen dipol nol.

Dalam struktur ideal, C₂H₄ termasuk kelompok titik **D_{2h}**. Molekul ini memiliki beberapa sumbu rotasi C₂, bidang simetri, dan pusat inversi. Keberadaan pusat inversi sangat penting karena molekul yang memiliki pusat inversi tidak dapat memiliki momen dipol permanen. Oleh karena itu, etilena bersifat nonpolar.

Secara konseptual:

C₂H₄
 → molekul planar
 → memiliki pusat inversi
 → kelompok titik D_{2h}

- resultan dipol nol
- molekul nonpolar

Meskipun ikatan C–H dapat memiliki polaritas kecil, distribusi ikatan dalam etilena tersusun simetris sehingga vektor dipol saling meniadakan. Selain itu, sistem π pada ikatan C=C juga tersusun simetris terhadap bidang molekul.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	C ₂ H ₄
Bentuk	Planar
Kelompok titik	D _{2h}
Polaritas	Nonpolar
Penyebab utama	Pusat inversi dan simetri planar
Fokus analisis	Hubungan planaritas, pusat inversi, dan momen dipol nol

Contoh analisis laporan:

C₂H₄ memiliki struktur planar dan kelompok titik D_{2h}. Molekul ini memiliki pusat inversi sehingga resultan momen dipol permanennya nol. Oleh karena itu, etilena bersifat nonpolar dalam struktur ideal.

C₂H₄ penting karena menghubungkan Bab 7 dan Bab 8. Pada Bab 7, etilena digunakan untuk memahami HOMO-LUMO. Pada Bab 8, etilena digunakan untuk memahami simetri dan momen dipol. Dengan demikian, satu molekul dapat dianalisis dari beberapa sudut pandang kimia kuantum.

9. Benzena sebagai Model Simetri Tinggi pada Sistem Aromatik

Benzena merupakan molekul aromatik planar dengan rumus C₆H₆. Dalam struktur ideal, benzena memiliki enam atom C dalam cincin heksagonal dan enam atom H yang terikat pada masing-masing atom C. Molekul ini sangat penting dalam kimia organik, kimia kuantum, dan teori grup karena memiliki simetri tinggi.

Dalam analisis simetri, benzena termasuk kelompok titik **D_{6h}**. Molekul ini memiliki sumbu C₆ tegak lurus bidang cincin, beberapa sumbu C₂, bidang horizontal, bidang vertikal, dan pusat inversi. Karena simetrinya sangat tinggi, momen dipol permanen benzena adalah nol.

Secara konseptual:

- Benzena
- planar aromatik
 - kelompok titik D_{6h}
 - distribusi atom dan elektron sangat simetris

- resultan dipol nol
- molekul nonpolar

Benzena penting karena memperlihatkan bahwa simetri tidak hanya berkaitan dengan susunan atom, tetapi juga dengan distribusi elektron π yang terdelokalisasi. Dalam Bab 7, benzena dibahas sebagai sistem aromatik dengan orbital π terdelokalisasi. Dalam Bab 8, benzena dibahas sebagai sistem aromatik planar dengan simetri tinggi dan momen dipol nol.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	Benzena
Bentuk	Planar aromatik
Kelompok titik	D_{6h}
Polaritas	Nonpolar
Penyebab utama	Simetri tinggi dan pusat inversi
Fokus analisis	Hubungan aromaticitas, planaritas, dan simetri

Contoh analisis laporan:

Benzena memiliki struktur planar aromatik dengan kelompok titik D_{6h} . Susunan atom C dan H sangat simetris, dan molekul memiliki pusat inversi. Karena semua kontribusi vektor dipol saling meniadakan, benzena tidak memiliki momen dipol permanen dan bersifat nonpolar.

Benzena juga berguna untuk memperkenalkan hubungan simetri dengan spektroskopi. Karena memiliki pusat inversi, benzena mengikuti pola seleksi tertentu dalam IR dan Raman. Pembahasan rinci memerlukan teori grup lanjutan, tetapi mahasiswa perlu memahami bahwa simetri tinggi benzena memiliki konsekuensi luas.

10. Perbandingan H_2O dan CO_2

Perbandingan H_2O dan CO_2 adalah salah satu inti Praktikum 5. Kedua molekul sama-sama memiliki tiga atom dan ikatan polar, tetapi polaritasnya berbeda.

Aspek	H_2O	CO_2
Bentuk	Bengkok	Linear
Ikatan polar	O–H	C=O
Kelompok titik	C_{2v}	$D_{\infty h}$
Resultan dipol	Tidak nol	Nol
Polaritas	Polar	Nonpolar

Analisis konseptual:

H₂O polar karena bentuknya bengkok sehingga vektor dipol O-H tidak saling meniadakan.

CO₂ nonpolar karena bentuknya linear sehingga dua vektor dipol C=O saling meniadakan.

Perbandingan ini membantu mahasiswa memahami bahwa polaritas molekul tidak ditentukan oleh jumlah atom atau keberadaan ikatan polar saja. Bentuk dan simetri adalah faktor kunci.

11. Perbandingan NH₃ dan BF₃

NH₃ dan BF₃ sama-sama memiliki tiga atom terminal di sekitar atom pusat, tetapi polaritasnya berbeda.

Aspek	NH ₃	BF ₃
Bentuk	Piramidal trigonal	Trigonal planar
Kelompok titik	C _{3v}	D _{3h}
Pasangan elektron bebas pada atom pusat	Ada	Tidak ada
Resultan dipol	Tidak nol	Nol
Polaritas	Polar	Nonpolar

Analisis konseptual:

NH₃ polar karena bentuk piramidal membuat vektor dipol N-H tidak saling meniadakan.

BF₃ nonpolar karena bentuk trigonal planar membuat tiga vektor dipol B-F saling meniadakan.

Perbandingan ini penting karena mengajarkan bahwa jumlah atom terminal yang sama tidak menjamin polaritas yang sama. Geometri tiga dimensi dan simetri menentukan resultan dipol.

12. Perbandingan CH₄, C₂H₄, dan Benzena

CH₄, C₂H₄, dan benzena sama-sama nonpolar dalam struktur ideal, tetapi alasan simetrinya berbeda.

Molekul	Kelompok Titik	Jenis Simetri Dominan	Alasan Nonpolar
CH ₄	T _d	Tetrahedral	Vektor ikatan tersusun simetris
C ₂ H ₄	D _{2h}	Planar dengan pusat inversi	Pusat inversi meniadakan momen dipol
Benzena	D _{6h}	Aromatik planar simetri tinggi	Simetri tinggi dan pusat inversi

Analisis ini menunjukkan bahwa nonpolaritas dapat muncul dari beberapa jenis simetri. CH_4 nonpolar karena susunan tetrahedralnya. C_2H_4 nonpolar karena planaritas dan pusat inversi. Benzena nonpolar karena simetri aromatik yang sangat tinggi. Dengan demikian, mahasiswa tidak boleh menghafal “molekul simetris nonpolar” secara dangkal, tetapi harus menyebut jenis simetri yang menyebabkan resultan dipol nol.

13. Data Minimum yang Harus Dikumpulkan untuk Setiap Molekul

Untuk setiap molekul model, mahasiswa harus mengumpulkan data berikut:

1. Nama molekul.
2. Rumus molekul.
3. Struktur awal.
4. Struktur hasil optimasi.
5. Bentuk molekul.
6. Unsur simetri utama.
7. Kelompok titik.
8. Momen dipol total.
9. Komponen momen dipol jika tersedia.
10. Klasifikasi polar atau nonpolar.
11. Software yang digunakan.
12. Metode perhitungan.
13. Basis set.
14. Status optimasi.
15. Catatan analisis vektor dipol.

Format tabel data awal:

Molekul	Bentuk	Kelompok Titik	μ Total (D)	Polaritas	Catatan
H_2O	Bengkok	C_{2v}	...	Polar	Vektor O–H tidak saling meniadakan
NH_3	Piramidal trigonal	C_{3v}	...	Polar	Resultan sepanjang sumbu C_3
BF_3	Trigonal planar	D_{3h}	...	Nonpolar	Tiga vektor B–F saling meniadakan
CH_4	Tetrahedral	T^d	...	Nonpolar	Simetri tetrahedral
CO_2	Linear	$\text{D}_{\infty h}$	...	Nonpolar	Dua vektor C=O berlawanan
C_2H_4	Planar	D_{2h}	...	Nonpolar	Memiliki pusat inversi
Benzena	Planar aromatik	D_{6h}	...	Nonpolar	Simetri tinggi dan pusat inversi

Tabel ini menjadi dasar untuk subbab 8.5, 8.6, 8.8, dan 8.9.

14. Kesalahan Umum dalam Memahami Molekul Model

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Penjelasan
Menganggap semua ikatan polar menghasilkan molekul polar	Salah karena vektor dipol dapat saling meniadakan
Menganggap CO ₂ nonpolar karena ikatan C=O tidak polar	Salah; ikatan C=O polar, tetapi resultannya nol
Menganggap BF ₃ nonpolar karena B–F tidak polar	Salah; B–F polar, tetapi simetri trigonal planar meniadakan dipol
Menganggap NH ₃ trigonal planar	Salah; NH ₃ piramidal trigonal
Menganggap H ₂ O linear	Salah; H ₂ O bengkok
Mengabaikan pusat inversi pada C ₂ H ₄ dan benzena	Membuat analisis simetri kurang lengkap
Menganggap nilai momen dipol kecil pasti bermakna	Bisa hanya akibat toleransi numerik
Menghafal kelompok titik tanpa menjelaskan unsur simetri	Pemahaman teoritis lemah
Menggunakan struktur belum teroptimasi tanpa catatan	Data momen dipol kurang valid
Tidak membedakan polaritas dan kiralitas	Dua konsep berbeda

Kesalahan-kesalahan tersebut sering muncul karena mahasiswa terlalu mengandalkan hafalan. Praktikum 5 harus diarahkan agar mahasiswa membangun penjelasan berdasarkan bentuk, simetri, dan vektor.

15. Implikasi Pemilihan Molekul Model terhadap Pembelajaran

Pemilihan molekul model dalam Praktikum 5 memiliki implikasi pembelajaran yang kuat. Dengan H₂O dan CO₂, mahasiswa memahami bahwa bentuk bengkok dan linear menghasilkan polaritas berbeda. Dengan NH₃ dan BF₃, mahasiswa memahami perbedaan piramidal trigonal dan trigonal planar. Dengan CH₄, mahasiswa memahami simetri tetrahedral. Dengan C₂H₄, mahasiswa memahami planaritas dan pusat inversi. Dengan benzena, mahasiswa memahami simetri tinggi pada sistem aromatik.

Secara keseluruhan, molekul model ini membantu mahasiswa membangun cara berpikir berikut:

bentuk molekul
 → unsur simetri
 → kelompok titik
 → resultan vektor dipol
 → polaritas molekul

→ implikasi sifat molekul

Cara berpikir ini sangat penting dalam kimia. Polaritas memengaruhi gaya antarmolekul, kelarutan, titik didih, interaksi molekul, spektrum, dan reaktivitas. Dengan memahami molekul model sederhana, mahasiswa memiliki fondasi untuk menganalisis molekul yang lebih kompleks.

16. Transisi ke Jalur ChemCompute

Subbab 8.4 telah membahas molekul model Praktikum 5, yaitu H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena. Ketujuh molekul tersebut dipilih karena mampu memperlihatkan hubungan yang jelas antara bentuk molekul, unsur simetri, kelompok titik, momen dipol, dan polaritas. Molekul-molekul ini juga cukup sederhana untuk dihitung menggunakan ChemCompute, ORCA, Gaussian, dan dianalisis lebih lanjut dengan Python.

Subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Pada subbab 8.5, mahasiswa akan diarahkan menjalankan optimasi geometri dan menghitung momen dipol melalui paket yang tersedia di ChemCompute. Molekul model yang telah dijelaskan pada subbab ini akan menjadi objek utama dalam proses perhitungan tersebut.

8.5 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 5 digunakan untuk menjalankan **optimasi geometri** dan memperoleh **momen dipol** molekul melalui paket komputasi yang tersedia di platform ChemCompute. Jalur ini dirancang agar mahasiswa dapat melakukan praktikum kimia kuantum berbasis web tanpa harus memasang software komputasi berat secara lokal. Dengan demikian, mahasiswa dapat lebih fokus pada pemahaman hubungan antara **struktur molekul, kelompok titik, simetri, dan polaritas**, bukan terhambat oleh instalasi perangkat lunak, konfigurasi sistem operasi, atau pengaturan komputasi yang terlalu teknis.

Namun, jalur ChemCompute tidak boleh dipahami sebagai proses otomatis yang cukup dilakukan dengan menekan tombol dan mengambil angka akhir. ChemCompute adalah **platform akses**, bukan pengganti penalaran kimia. Mahasiswa tetap harus membangun struktur dengan benar, memilih metode yang sesuai, memeriksa muatan dan multiplicity, memastikan optimasi geometri selesai normal, membaca momen dipol dari output, lalu menghubungkan nilai tersebut dengan simetri molekul. Dengan kata lain, ChemCompute mempermudah akses komputasi, tetapi validitas analisis tetap bergantung pada pemahaman mahasiswa terhadap input, output, dan teori simetri.

Dalam Praktikum 5, molekul yang dianalisis melalui jalur ChemCompute adalah **H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena**. Molekul-molekul ini dipilih karena memberikan pola hubungan yang jelas antara geometri dan momen dipol. H_2O dan NH_3 diharapkan menunjukkan momen dipol tidak nol karena bentuk molekulnya menyebabkan resultan vektor dipol tidak saling meniadakan. BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena secara ideal memiliki momen dipol nol atau sangat mendekati nol karena simetri molekulnya tinggi.

Prinsip utama jalur ChemCompute dapat diringkas sebagai berikut:

```
struktur molekul yang benar
→ optimasi geometri
→ output momen dipol
→ validasi kelompok titik
→ klasifikasi polar/nonpolar
→ analisis hubungan simetri dan momen dipol
```

1. Pengertian Jalur ChemCompute dalam Praktikum 5

Jalur ChemCompute adalah alur kerja praktikum yang menggunakan ChemCompute sebagai media untuk menjalankan perhitungan kimia komputasi berbasis web. Dalam Praktikum 5, tujuan utama jalur ini adalah memperoleh **geometri teroptimasi** dan **momen dipol molekul**.

Optimasi geometri diperlukan karena momen dipol bergantung pada posisi atom dan distribusi elektron. Jika struktur molekul belum teroptimasi, nilai momen dipol yang diperoleh dapat kurang representatif. Misalnya, BF_3 yang seharusnya trigonal planar dan nonpolar dapat menunjukkan momen dipol kecil jika struktur awalnya tidak simetris. Demikian pula CO_2 yang seharusnya linear dan nonpolar dapat memberikan nilai momen dipol tidak nol jika struktur awalnya bengkok atau tidak teroptimasi dengan baik.

Momen dipol yang diperoleh dari perhitungan komputasi merupakan hasil dari distribusi muatan elektronik dan geometri molekul. Dalam pendekatan kuantum, momen dipol tidak hanya berasal dari muatan inti, tetapi juga dari distribusi elektron. Oleh karena itu, nilai momen dipol dari output software lebih kompleks daripada sekadar penjumlahan muatan titik sederhana. Namun, secara konseptual, mahasiswa tetap dapat memahaminya sebagai ukuran pemisahan muatan dalam molekul.

Dalam laporan praktikum, mahasiswa tidak cukup menulis:

Momen dipol dihitung dengan ChemCompute.

Pernyataan yang lebih tepat adalah:

Optimasi geometri dan perhitungan momen dipol dilakukan melalui ChemCompute menggunakan paket komputasi yang tersedia. Metode, basis set, muatan, multiplicity, dan status optimasi dicatat berdasarkan output perhitungan.

Penulisan seperti ini lebih ilmiah karena membedakan antara platform, software, metode, dan hasil.

2. Kedudukan ChemCompute dalam Pembelajaran Simetri dan Momen Dipol

Dalam pembelajaran kimia komputasi, salah satu kendala utama adalah akses terhadap perangkat lunak dan perangkat keras. ChemCompute membantu mengatasi kendala tersebut dengan menyediakan jalur berbasis web. Mahasiswa dapat menjalankan perhitungan tanpa perlu menginstal ORCA, Gaussian, GAMESS, atau paket lain secara mandiri. Ini sangat berguna untuk kelas besar, laboratorium pendidikan, atau mahasiswa yang masih berada pada tahap awal pembelajaran komputasi.

Akan tetapi, kemudahan akses membawa risiko pedagogis. Mahasiswa dapat tergoda memperlakukan ChemCompute sebagai “kotak hitam”: memasukkan molekul, menjalankan job, mengambil angka, lalu menulis laporan tanpa memahami prosesnya. Risiko ini harus dihindari. Praktikum 5 harus menempatkan ChemCompute sebagai alat untuk memperkuat pemahaman, bukan sebagai pengganti pemahaman.

Dalam literatur kimia komputasi, seperti pada pembahasan Jensen, Cramer, Lewars, Leach, dan Young, perhitungan molekul selalu menuntut perhatian terhadap input, metode, basis set, validasi output, dan interpretasi. Prinsip ini juga berlaku pada jalur ChemCompute. Mahasiswa harus mengetahui bahwa hasil momen dipol bergantung pada struktur, metode, dan kualitas perhitungan. Nilai momen dipol yang tampak kecil atau besar harus ditafsirkan berdasarkan simetri molekul dan status output.

Dengan demikian, kedudukan ChemCompute dalam Praktikum 5 adalah sebagai **jembatan pembelajaran**. Ia menghubungkan teori simetri dan momen dipol dengan hasil komputasi nyata, tetapi tetap memerlukan analisis kritis dari mahasiswa.

3. Persiapan Struktur Molekul Sebelum Masuk ChemCompute

Sebelum menjalankan perhitungan di ChemCompute, mahasiswa harus menyiapkan struktur molekul. Struktur dapat dibuat dengan Avogadro atau editor molekul lain. Tahap ini sangat penting karena kesalahan struktur awal dapat memengaruhi hasil optimasi dan momen dipol.

Molekul yang disiapkan adalah:

1. H₂O
2. NH₃
3. BF₃
4. CH₄
5. CO₂
6. C₂H₄
7. Benzena

Setiap molekul harus diperiksa berdasarkan bentuk idealnya:

Molekul	Bentuk Ideal	Catatan Persiapan
H ₂ O	Bengkok	Pastikan tidak linear

NH ₃	Piramidal trigonal	Pastikan tidak trigonal planar
BF ₃	Trigonal planar	Pastikan tiga F tersusun simetris
CH ₄	Tetrahedral	Pastikan empat H lengkap
CO ₂	Linear	Pastikan O=C=O lurus
C ₂ H ₄	Planar	Pastikan semua H lengkap
Benzena	Planar aromatik	Pastikan cincin dan H lengkap

Kesalahan umum pada tahap persiapan adalah membuat NH₃ menjadi trigonal planar, membuat CO₂ tidak linear, membuat BF₃ tidak simetris, atau lupa menambahkan atom H pada benzena dan etilena. Kesalahan semacam ini dapat menghasilkan kelompok titik dan momen dipol yang keliru.

Langkah persiapan struktur yang dianjurkan:

1. Bangun molekul di Avogadro.
2. Tambahkan seluruh atom H.
3. Periksa valensi atom.
4. Periksa bentuk molekul secara visual.
5. Lakukan clean geometry awal jika tersedia.
6. Simpan struktur awal.
7. Catat nama file struktur.

Contoh nama file struktur:

```
h2o_awal.xyz
nh3_awal.xyz
bf3_awal.xyz
ch4_awal.xyz
co2_awal.xyz
c2h4_awal.xyz
benzena_awal.xyz
```

Penamaan file yang rapi penting agar data tidak tertukar.

4. Muatan dan Multiplicity Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 5 umumnya dihitung sebagai molekul netral dalam keadaan singlet tertutup. Oleh karena itu, muatan total dan multiplicity yang digunakan adalah:

```
muatan = 0
multiplicity = 1
```

Tabel ringkas:

Molekul	Muatan	Multiplicity	Keterangan
H ₂ O	0	1	Molekul netral singlet
NH ₃	0	1	Molekul netral singlet
BF ₃	0	1	Molekul netral singlet

CH ₄	0	1	Molekul netral singlet
CO ₂	0	1	Molekul netral singlet
C ₂ H ₄	0	1	Molekul netral singlet
Benzena	0	1	Molekul netral singlet

Kesalahan muatan atau multiplicity merupakan kesalahan serius. Jika mahasiswa memasukkan muatan salah, jumlah elektron molekul berubah. Jika multiplicity salah, keadaan spin yang dihitung tidak sesuai dengan molekul target. Akibatnya, geometri dan momen dipol dapat berubah.

Dalam laporan, mahasiswa harus mencatat muatan dan multiplicity agar perhitungan dapat direproduksi.

5. Pemilihan Metode Perhitungan

Dalam jalur ChemCompute, metode yang digunakan bergantung pada paket komputasi yang tersedia. Secara umum, mahasiswa dapat menggunakan metode DFT, Hartree–Fock, atau semiempiris. Untuk Praktikum 5, metode DFT sering menjadi pilihan baik karena mampu memberikan geometri dan momen dipol yang cukup representatif untuk pembelajaran. Namun, metode yang lebih sederhana juga dapat digunakan jika tujuan utamanya adalah memahami hubungan simetri dan polaritas.

Perbandingan umum:

Metode	Kelebihan	Keterbatasan	Posisi dalam Praktikum
Semiempiris	Cepat dan ringan	Akurasi terbatas	Alternatif jika waktu terbatas
Hartree–Fock	Teori dasar jelas	Korelasi elektron belum lengkap	Baik untuk pembelajaran dasar
DFT	Umumnya baik untuk geometri dan sifat molekul	Bergantung fungsional dan basis set	Pilihan utama jika tersedia

Jika DFT digunakan, mahasiswa harus mencatat fungsional dan basis set. Contoh:

```
Metode      : DFT
Fungsional  : B3LYP
Basis set   : 6-31G(d)
Platform    : ChemCompute
Molekul     : H2O
Job         : Optimasi geometri dan momen dipol
```

Jika metode lain digunakan, informasi tetap harus ditulis lengkap. Jangan hanya menulis “metode komputer” atau “perhitungan ChemCompute” tanpa rincian.

Konsistensi metode sangat penting. Jika H₂O dihitung dengan DFT/B3LYP/6-31G(d), maka NH₃, BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena sebaiknya dihitung dengan metode yang sama agar perbandingan momen dipol lebih bermakna. Jika metode berbeda digunakan, mahasiswa harus memberi catatan dalam laporan.

6. Jenis Job: Optimasi Geometri dan Momen Dipol

Dalam Praktikum 5, jenis job utama adalah **optimasi geometri**. Optimasi geometri mencari susunan atom yang stabil menurut metode perhitungan yang dipilih. Setelah geometri teroptimasi, output biasanya memuat sifat molekul, termasuk momen dipol.

Alur ideal:

```
struktur awal
→ optimasi geometri
→ struktur teroptimasi
→ momen dipol
→ analisis polaritas dan simetri
```

Optimasi geometri penting karena struktur awal dari editor molekul hanya perkiraan. Struktur tersebut belum tentu memenuhi kondisi energi minimum. Jika momen dipol dihitung pada struktur awal yang tidak wajar, hasilnya dapat menyesatkan.

Dalam beberapa paket komputasi, momen dipol dapat dihitung secara otomatis setelah optimasi. Dalam paket lain, perlu pengaturan tambahan atau pembacaan bagian tertentu dari output. Mahasiswa harus membaca output dengan teliti.

Data yang harus dicatat dari output:

Data	Keterangan
Energi akhir	Menunjukkan hasil akhir optimasi
Status optimasi	Selesai normal atau gagal
Koordinat akhir	Struktur teroptimasi
Komponen μ_x	Komponen momen dipol arah x
Komponen μ_y	Komponen momen dipol arah y
Komponen μ_z	Komponen momen dipol arah z
μ total	Besar momen dipol total
Satuan	Umumnya Debye

Jika optimasi gagal, data momen dipol tidak boleh langsung dipakai sebagai hasil final. Mahasiswa harus memperbaiki struktur input atau memilih pengaturan yang lebih sesuai.

7. Langkah Umum Menjalankan Jalur ChemCompute

Langkah umum menjalankan Praktikum 5 melalui ChemCompute dapat disusun sebagai berikut.

a. Menyiapkan Struktur Molekul

Mahasiswa membuat struktur molekul di Avogadro atau editor molekul lain. Setelah struktur dibuat, mahasiswa memeriksa geometri, valensi, dan atom H.

Contoh:

H_2O → bentuk bengkok
 NH_3 → piramidal trigonal
 BF_3 → trigonal planar
 CH_4 → tetrahedral
 CO_2 → linear
 C_2H_4 → planar
 Benzena → planar aromatik

b. Masuk ke ChemCompute

Mahasiswa membuka ChemCompute melalui browser, kemudian memilih jenis perhitungan dan paket komputasi yang tersedia. Pada tahap ini, mahasiswa harus memperhatikan instruksi platform dan pilihan metode.

c. Memilih Molekul atau Mengunggah Struktur

Jika platform menyediakan editor molekul internal, mahasiswa dapat membangun struktur langsung. Jika tidak, mahasiswa mengunggah file struktur yang telah disiapkan. Format file harus sesuai dengan ketentuan platform.

d. Memilih Metode dan Basis Set

Mahasiswa memilih metode perhitungan, misalnya DFT, Hartree–Fock, atau semiempiris. Jika DFT digunakan, mahasiswa memilih fungsional dan basis set. Semua pilihan harus dicatat.

e. Mengatur Muatan dan Multiplicity

Untuk semua molekul model:

```
muatan total = 0
multiplicity = 1
```

Mahasiswa harus memastikan pengaturan ini benar sebelum job dijalankan.

f. Menjalankan Optimasi Geometri

Mahasiswa menjalankan job optimasi geometri. Selama proses berjalan, mahasiswa mencatat nama job dan molekul yang dihitung.

g. Mengunduh Output

Setelah job selesai, output harus diunduh dan disimpan. File output asli tidak boleh dihapus karena menjadi bukti reproduibilitas.

h. Membaca Momen Dipol

Mahasiswa mencari bagian output yang memuat momen dipol. Biasanya output memuat komponen dipol dan total momen dipol.

i. Menyusun Tabel Data Awal

Data dimasukkan ke tabel awal untuk dianalisis lebih lanjut.

8. Format Tabel Data dari ChemCompute

Tabel data awal dari ChemCompute dapat dibuat sebagai berikut:

Molekul	Bentuk	Kelompok Titik	Metode	Basis Set	μ_x	μ_y	μ_z	μ Total (D)	Polaritas
H ₂ O	Bengkok	C _{2v}	...	...	...	...	...	...	Polar
NH ₃	Piramidal trigonal	C _{3v}	...	...	...	...	...	...	Polar
BF ₃	Trigonal planar	D _{3h}	...	...	...	...	...	...	Nonpolar
CH ₄	Tetrahedral	T ^d	...	...	...	...	...	...	Nonpolar
CO ₂	Linear	D ∞ h	...	...	...	...	...	...	Nonpolar
C ₂ H ₄	Planar	D _{2h}	...	...	...	...	...	...	Nonpolar
Benzena	Planar aromatik	D _{6h}	...	...	...	...	...	...	Nonpolar

Tabel ini harus dilengkapi dengan catatan metode. Jika semua molekul menggunakan metode yang sama, metode dapat ditulis sekali dalam keterangan tabel. Jika metode berbeda, metode harus ditulis pada setiap baris.

Untuk molekul nonpolar, nilai momen dipol hasil perhitungan dapat mendekati nol tetapi tidak selalu persis nol. Dalam perhitungan numerik, nilai seperti 0,0001 D atau 0,0003 D dapat dianggap mendekati nol jika geometri dan simetrinya benar. Namun, jika nilai momen dipol BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, atau benzena cukup besar, mahasiswa harus memeriksa kembali struktur dan status optimasi.

9. Contoh Analisis H₂O melalui ChemCompute

Pada H₂O, mahasiswa menjalankan optimasi geometri dan membaca momen dipol total dari output. H₂O diharapkan memiliki momen dipol tidak nol karena bentuknya bengkok.

Langkah konseptual:

H₂O
 → optimasi geometri
 → bentuk akhir bengkok
 → momen dipol total tidak nol
 → polar

Analisis yang diharapkan:

H₂O memiliki bentuk bengkok dan termasuk kelompok titik C_{2v}. Dua ikatan O-H bersifat polar. Karena vektor dipol O-H tidak tersusun saling berlawanan secara linear, resultannya tidak nol. Nilai momen dipol dari output ChemCompute konsisten dengan sifat polar H₂O.

Mahasiswa perlu memeriksa apakah struktur akhir tetap bengkok. Jika output menunjukkan struktur tidak wajar, perhitungan harus diperiksa ulang.

10. Contoh Analisis NH₃ melalui ChemCompute

NH₃ diharapkan memiliki momen dipol tidak nol. Bentuk piramidal trigonal menyebabkan tiga vektor dipol N-H tidak saling meniadakan.

Langkah konseptual:

NH₃
 → optimasi geometri
 → bentuk piramidal trigonal
 → kelompok titik C_{3v}
 → momen dipol tidak nol
 → polar

Analisis yang diharapkan:

NH₃ memiliki bentuk piramidal trigonal dengan kelompok titik C_{3v}. Tiga ikatan N-H memiliki vektor dipol yang tidak saling meniadakan karena geometri molekul tidak planar simetris seperti BF₃. Oleh karena itu, NH₃ memiliki momen dipol total tidak nol dan bersifat polar.

NH₃ harus dibandingkan dengan BF₃ untuk memperkuat pemahaman bahwa jumlah atom terminal yang sama tidak menentukan polaritas jika bentuk molekul berbeda.

11. Contoh Analisis BF_3 melalui ChemCompute

BF_3 adalah contoh molekul dengan ikatan polar tetapi momen dipol total nol. Setelah optimasi geometri, BF_3 seharusnya tetap trigonal planar.

Langkah konseptual:

BF_3

- optimasi geometri
- bentuk trigonal planar
- kelompok titik D_{3h}
- tiga vektor B-F saling meniadakan
- momen dipol mendekati nol
- nonpolar

Analisis yang diharapkan:

BF_3 memiliki tiga ikatan B-F yang polar, tetapi bentuk molekulnya trigonal planar dan sangat simetris. Tiga vektor dipol B-F tersusun dengan sudut 120° sehingga resultannya nol. Jika output ChemCompute menunjukkan momen dipol mendekati nol, hasil tersebut konsisten dengan kelompok titik D_{3h} dan sifat nonpolar BF_3 .

Jika hasil momen dipol BF_3 tidak mendekati nol, mahasiswa harus memeriksa apakah geometri BF_3 benar-benar planar dan apakah optimasi selesai normal.

12. Contoh Analisis CH_4 melalui ChemCompute

CH_4 memiliki bentuk tetrahedral dan kelompok titik T_d . Molekul ini diharapkan nonpolar karena simetri tetrahedral menyebabkan semua vektor dipol saling meniadakan.

Langkah konseptual:

CH_4

- optimasi geometri
- bentuk tetrahedral
- kelompok titik T_d
- resultan dipol nol
- nonpolar

Analisis yang diharapkan:

CH_4 memiliki bentuk tetrahedral yang simetris. Empat ikatan C-H tersusun mengarah ke sudut-sudut tetrahedron. Karena susunannya sangat simetris, kontribusi vektor dipol saling meniadakan. Momen dipol total CH_4 dari output ChemCompute seharusnya nol atau mendekati nol.

CH₄ dapat digunakan sebagai pembanding untuk molekul tetrahedral tersubstitusi. Jika salah satu H diganti atom lain, simetri turun dan momen dipol dapat muncul. Walaupun contoh substitusi tidak dihitung dalam Praktikum 5, konsep ini penting sebagai implikasi.

13. Contoh Analisis CO₂ melalui ChemCompute

CO₂ adalah contoh paling penting untuk menjelaskan bahwa ikatan polar dapat menghasilkan molekul nonpolar jika geometri simetris.

Langkah konseptual:

CO₂
 → optimasi geometri
 → struktur linear O=C=O
 → kelompok titik D_{∞h}
 → dua vektor C=O berlawanan arah
 → resultan dipol nol
 → nonpolar

Analisis yang diharapkan:

CO₂ memiliki dua ikatan C=O yang polar, tetapi molekulnya linear dan simetris. Dua vektor dipol C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan, sehingga resultannya nol. Nilai momen dipol CO₂ yang mendekati nol dari output ChemCompute konsisten dengan struktur linear dan kelompok titik D_{∞h}.

CO₂ harus dibandingkan dengan H₂O. Keduanya memiliki tiga atom, tetapi H₂O bengkok dan polar, sedangkan CO₂ linear dan nonpolar. Perbandingan ini menjadi salah satu inti analisis Bab 8.

14. Contoh Analisis C₂H₄ melalui ChemCompute

C₂H₄ atau etilena memiliki struktur planar dan kelompok titik D_{2h} dalam bentuk ideal. Molekul ini memiliki pusat inversi, sehingga tidak memiliki momen dipol permanen.

Langkah konseptual:

C₂H₄
 → optimasi geometri
 → struktur planar
 → kelompok titik D_{2h}
 → pusat inversi
 → momen dipol nol
 → nonpolar

Analisis yang diharapkan:

C_2H_4 memiliki struktur planar dan pusat inversi. Karena adanya pusat inversi, distribusi vektor dipol dalam molekul saling meniadakan. Oleh karena itu, etilena memiliki momen dipol total nol atau mendekati nol. Hasil ini konsisten dengan kelompok titik D_{2h} .

C_2H_4 menarik karena telah dibahas pada Bab 7 sebagai model HOMO-LUMO. Dalam Bab 8, molekul yang sama digunakan untuk melihat simetri dan momen dipol. Ini menunjukkan bahwa satu molekul dapat dipahami dari banyak sudut pandang kimia kuantum.

15. Contoh Analisis Benzena melalui ChemCompute

Benzena memiliki struktur planar aromatik dengan kelompok titik D_{6h} . Simetrinya sangat tinggi sehingga momen dipol permanennya nol.

Langkah konseptual:

Benzena
 → optimasi geometri
 → struktur planar aromatik
 → kelompok titik D_{6h}
 → pusat inversi dan simetri tinggi
 → momen dipol nol
 → nonpolar

Analisis yang diharapkan:

Benzena memiliki struktur planar aromatik dengan simetri tinggi. Dalam struktur ideal, benzena termasuk kelompok titik D_{6h} dan memiliki pusat inversi. Karena distribusi atom dan elektron sangat simetris, semua kontribusi vektor dipol saling meniadakan. Oleh karena itu, momen dipol total benzena seharusnya nol atau mendekati nol.

Jika output menunjukkan nilai momen dipol kecil tetapi tidak nol, mahasiswa harus memeriksa apakah struktur benzena benar-benar planar dan simetris. Nilai kecil dapat terjadi karena toleransi numerik atau geometri yang sedikit terdistorsi.

16. Validasi Output ChemCompute

Setelah output diperoleh, mahasiswa harus memvalidasi hasil sebelum memasukkannya ke laporan. Validasi meliputi:

Aspek	Pertanyaan Validasi
Job selesai	Apakah perhitungan selesai normal?
Geometri akhir	Apakah bentuk molekul sesuai teori?
Muatan	Apakah muatan total 0?
Multiplicity	Apakah multiplicity 1?
Metode	Apakah metode tercatat jelas?
Basis set	Apakah basis set tercatat?
Momen dipol	Apakah nilai total tersedia?
Satuan	Apakah satuan Debye atau lainnya?
Simetri	Apakah hasil sesuai kelompok titik ideal?
Output asli	Apakah file output disimpan?

Validasi ini penting karena kesalahan input dapat menghasilkan output yang tampak sah tetapi salah secara kimia. Misalnya, NH_3 yang dibuat planar dapat menghasilkan momen dipol berbeda dari NH_3 piramidal. CO_2 yang tidak linear dapat menghasilkan momen dipol tidak nol. BF_3 yang tidak trigonal planar dapat terlihat polar secara numerik.

Prinsip validasi:

hasil komputasi harus cocok dengan teori,
tetapi jika tidak cocok,
periksa input, geometri, metode, dan status optimasi sebelum menyimpulkan.

17. Menafsirkan Nilai Momen Dipol Mendekati Nol

Dalam perhitungan numerik, molekul yang secara teori nonpolar tidak selalu menghasilkan nilai momen dipol tepat 0,0000 D. Kadang muncul nilai sangat kecil, misalnya 0,0001 D atau 0,0005 D. Nilai tersebut biasanya dapat dianggap mendekati nol jika geometri dan simetri molekul benar.

Namun, mahasiswa harus hati-hati. Tidak semua nilai kecil boleh diabaikan tanpa pemeriksaan. Jika molekul seharusnya nonpolar tetapi momen dipolnya cukup besar, misalnya jauh di atas nilai numerik sangat kecil, maka ada kemungkinan struktur tidak simetris, input salah, atau optimasi belum selesai dengan baik.

Contoh interpretasi yang baik:

Momen dipol BF_3 dari output adalah sangat kecil dan mendekati nol. Nilai ini konsisten dengan struktur trigonal planar dan kelompok titik D_{3h} . Oleh karena itu, BF_3 diklasifikasikan sebagai nonpolar.

Contoh interpretasi yang kurang baik:

BF_3 polar karena hasil komputasi tidak benar-benar nol.

Pernyataan kedua kurang tepat jika nilai yang diperoleh hanya deviasi numerik sangat kecil. Mahasiswa harus memahami konsep toleransi numerik.

18. Format Penyimpanan Output ChemCompute

Output ChemCompute harus disimpan secara tertib. Struktur folder yang dianjurkan:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol/
├── output_chemcompute/
│   ├── h2o_output.log
│   ├── nh3_output.log
│   ├── bf3_output.log
│   ├── ch4_output.log
│   ├── co2_output.log
│   ├── c2h4_output.log
│   └── benzena_output.log
├── data/
│   └── data_momen_dipol_chemcompute.csv
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_05.docx
```

File output harus diberi nama jelas. Hindari nama seperti:

```
output1.log
hasil.log
molekul.log
fix.log
```

Nama file yang baik harus menyebut molekul dan jenis output:

```
h2o_chemcompute_output.log
co2_chemcompute_output.log
benzena_chemcompute_output.log
```

Penamaan yang tertib membantu reproduibilitas. Jika dosen meminta bukti nilai momen dipol, mahasiswa dapat menunjukkan file output asli.

19. Hubungan Jalur ChemCompute dengan Jalur Python Mandiri

Jalur ChemCompute menghasilkan data momen dipol dari perhitungan kimia komputasi. Jalur Python mandiri pada subbab berikutnya akan menggunakan data dan konsep tersebut untuk membuat analisis vektor sederhana.

Hubungan keduanya:

ChemCompute

- optimasi geometri
- momen dipol kuantum
- data tabel

Python

- input koordinat dan muatan parsial
- perhitungan vektor dipol sederhana
- klasifikasi polar/nonpolar
- visualisasi vektor dipol
- CSV dan grafik

ChemCompute memberi hasil perhitungan yang lebih berbasis struktur elektronik. Python memberi pemahaman konseptual tentang bagaimana vektor dipol dijumlahkan. Keduanya saling melengkapi.

Mahasiswa harus memahami bahwa hasil Python dari muatan parsial sederhana tidak harus sama persis dengan hasil ChemCompute. Perbedaan dapat terjadi karena momen dipol kuantum berasal dari distribusi elektron kontinu, sedangkan model Python menggunakan pendekatan muatan titik. Namun, jika konsepnya benar, pola polar/nonpolar seharusnya konsisten.

20. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum yang perlu dihindari adalah:

Kesalahan	Dampak
Tidak memeriksa bentuk molekul	Simetri dan momen dipol salah
Salah memasukkan muatan	Jumlah elektron salah
Salah multiplicity	Keadaan spin salah
Menggunakan metode berbeda tanpa catatan	Perbandingan kurang valid
Tidak melakukan optimasi	Momen dipol kurang representatif
Tidak menyimpan output asli	Data tidak dapat diverifikasi
Menganggap nilai sangat kecil pasti polar	Salah memahami toleransi numerik
Tidak mencatat basis set	Laporan tidak reproduibel
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Kesalahan metodologis
Tidak menghubungkan momen dipol dengan kelompok titik	Analisis dangkal

Kesalahan-kesalahan ini menunjukkan bahwa jalur ChemCompute tetap membutuhkan disiplin ilmiah. Platform web memudahkan akses, tetapi tidak menghapus kewajiban mahasiswa untuk berpikir kritis.

21. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki beberapa implikasi pembelajaran penting.

Pertama, mahasiswa dapat melihat hubungan langsung antara geometri molekul dan momen dipol. H_2O dan NH_3 menunjukkan momen dipol tidak nol, sedangkan BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena menunjukkan momen dipol nol atau mendekati nol. Pola ini memperkuat konsep bahwa simetri menentukan resultan dipol.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa hasil komputasi harus dibandingkan dengan teori. Jika hasil tidak sesuai, mahasiswa tidak boleh langsung menyalahkan teori atau menerima angka begitu saja. Mereka harus memeriksa input, geometri, metode, dan output.

Ketiga, mahasiswa belajar pentingnya reproduisibilitas. Output asli, tabel data, metode, basis set, dan catatan interpretasi harus disimpan.

Keempat, mahasiswa belajar membedakan platform, software, metode, dan hasil. ChemCompute adalah platform; metode bisa DFT, HF, atau semiempiris; hasil yang dibaca adalah geometri dan momen dipol.

Kelima, mahasiswa belajar menulis analisis ilmiah berbasis data. Mereka tidak hanya menyebut “ CO_2 nonpolar”, tetapi menjelaskan bahwa dua vektor dipol $\text{C}=\text{O}$ saling meniadakan karena struktur linear dan simetris.

Dengan demikian, jalur ChemCompute membantu mengubah konsep simetri dan polaritas dari hafalan menjadi pengalaman komputasional yang dapat diamati, dihitung, dan dianalisis.

22. Transisi ke Jalur Python Mandiri

Subbab 8.5 telah membahas jalur ChemCompute untuk menjalankan optimasi geometri dan menghitung momen dipol molekul model. Jalur ini menghasilkan data penting berupa geometri teroptimasi, nilai momen dipol, komponen vektor dipol jika tersedia, dan informasi metode perhitungan. Data tersebut kemudian digunakan untuk menganalisis hubungan antara kelompok titik, simetri molekul, dan polaritas.

Subbab berikutnya akan membahas jalur Python mandiri. Pada subbab 8.6, mahasiswa akan diarahkan menggunakan Python untuk memasukkan koordinat molekul, menghitung pusat massa, menghitung vektor dipol sederhana dari muatan parsial, menentukan polar atau nonpolar berdasarkan besar momen dipol, memvisualisasikan vektor dipol, serta membuat tabel klasifikasi kelompok titik berdasarkan data mahasiswa. Dengan demikian, jalur ChemCompute dan jalur Python akan saling melengkapi: ChemCompute memberikan hasil komputasi, sedangkan Python memperjelas logika vektorial di balik momen dipol.

8.6 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri dalam Praktikum 5 digunakan untuk membantu mahasiswa memahami momen dipol sebagai **besaran vektor** yang muncul dari hubungan antara posisi atom dan distribusi muatan. Jika jalur ChemCompute pada subbab 8.5 memberikan momen dipol dari

perhitungan struktur elektronik, maka jalur Python mandiri memberikan pengalaman konseptual yang lebih eksplisit: mahasiswa memasukkan koordinat molekul, memasukkan muatan parsial, menghitung pusat massa, menghitung vektor dipol sederhana, menentukan klasifikasi polar atau nonpolar, memvisualisasikan arah vektor dipol, dan menyusun tabel kelompok titik berdasarkan analisis mahasiswa.

Dengan demikian, Python pada Praktikum 5 bukan dimaksudkan untuk menggantikan perhitungan kuantum dalam ChemCompute, ORCA, atau Gaussian. Python digunakan sebagai alat pembelajaran dan analisis data. Melalui Python, mahasiswa dapat melihat bahwa momen dipol bukan sekadar angka dalam output software, tetapi hasil dari penjumlahan vektor kontribusi muatan terhadap posisi atom. Inilah nilai pedagogis utama jalur Python: ia memperlihatkan struktur matematika sederhana di balik konsep polaritas molekul.

Kode Python dalam Praktikum 5 wajib memuat enam komponen berikut:

1. **Input koordinat molekul.**
2. **Perhitungan pusat massa.**
3. **Perhitungan vektor dipol sederhana dari muatan parsial.**
4. **Penentuan polar atau nonpolar berdasarkan besar momen dipol.**
5. **Visualisasi vektor dipol.**
6. **Tabel klasifikasi kelompok titik secara manual berbasis data mahasiswa.**

Keenam komponen tersebut menunjukkan bahwa jalur Python mandiri menggabungkan aspek geometri, vektor, data, visualisasi, dan interpretasi kimia. Mahasiswa tidak hanya menjalankan kode, tetapi harus memahami hubungan antara rumus, data input, output numerik, dan kesimpulan polaritas.

1. Kedudukan Python dalam Praktikum 5

Python dalam Praktikum 5 berperan sebagai **alat analisis mandiri**. Jalur ini tidak menghitung distribusi elektron secara kuantum sebagaimana dilakukan oleh DFT atau Hartree–Fock. Python hanya menghitung momen dipol sederhana berdasarkan model muatan titik. Karena itu, hasil Python harus dipahami sebagai pendekatan konseptual, bukan sebagai pengganti nilai momen dipol dari output perhitungan struktur elektronik.

Alur kerja Python dalam Praktikum 5 dapat ditulis sebagai berikut:

```
koordinat atom
→ massa atom
→ pusat massa
→ muatan parsial
→ vektor dipol sederhana
→ besar momen dipol
→ klasifikasi polar/nonpolar
→ visualisasi vektor
→ tabel dan CSV
```

Alur tersebut membantu mahasiswa memahami bahwa momen dipol bergantung pada dua hal utama: **posisi muatan** dan **besar muatan**. Jika distribusi muatan simetris, vektor-vektor dipol dapat saling meniadakan. Jika distribusi muatan tidak simetris, resultan vektor dipol tidak nol.

Dalam laporan praktikum, mahasiswa harus membedakan dua jenis hasil:

Jenis Hasil	Sumber	Makna
Momen dipol kuantum	ChemCompute, ORCA, Gaussian	Dihitung dari distribusi elektron dan inti
Momen dipol sederhana	Python	Dihitung dari koordinat dan muatan parsial titik

Perbedaan ini penting agar mahasiswa tidak menyamakan model sederhana Python dengan hasil kuantum penuh. Python membantu memahami konsep, sedangkan software struktur elektronik memberikan hasil yang lebih mendekati deskripsi kuantum.

2. Dasar Teori Perhitungan Vektor Dipol

Momen dipol molekul adalah besaran vektor yang menggambarkan pemisahan muatan dalam ruang. Secara sederhana, jika terdapat sejumlah muatan q_i pada posisi r_i , maka vektor dipol dapat dihitung sebagai:

$$\mu = \sum q_i r_i$$

Dalam koordinat Cartesian tiga dimensi, rumus tersebut dapat ditulis menjadi:

$$\mu_x = \sum q_i x_i$$

$$\mu_y = \sum q_i y_i$$

$$\mu_z = \sum q_i z_i$$

Besar vektor dipol total adalah:

$$|\mu| = \sqrt{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)}$$

Jika koordinat dinyatakan dalam Ångström dan muatan dinyatakan dalam satuan muatan elementer e , maka hasil awal berada dalam satuan $e\text{Å}$. Untuk mengubah ke Debye, digunakan hubungan:

$$1 e\text{Å} \approx 4,80320427 \text{ Debye}$$

Maka:

$$\mu(\text{Debye}) = \mu(e\text{Å}) \times 4,80320427$$

Rumus ini digunakan dalam kode Python sebagai pendekatan sederhana. Namun, mahasiswa perlu memahami bahwa perhitungan ini bergantung pada muatan parsial yang dimasukkan. Muatan parsial bukan observabel tunggal yang mutlak. Nilainya dapat berbeda bergantung metode, misalnya Mulliken, Löwdin, Hirshfeld, CM5, NBO, RESP, atau metode lain. Karena itu, hasil momen dipol berbasis muatan parsial harus ditafsirkan sebagai model.

3. Mengapa Pusat Massa Perlu Dihitung?

Dalam Praktikum 5, kode Python wajib menghitung **pusat massa**. Pusat massa adalah titik rata-rata posisi atom yang dibobot oleh massa masing-masing atom. Rumus pusat massa adalah:

$$R_{cm} = \sum m_i r_i / \sum m_i$$

Dalam koordinat Cartesian:

$$X_{cm} = \sum m_i x_i / \sum m_i$$

$$Y_{cm} = \sum m_i y_i / \sum m_i$$

$$Z_{cm} = \sum m_i z_i / \sum m_i$$

Pusat massa penting karena memberikan titik acuan geometri molekul. Dalam visualisasi vektor dipol, vektor dapat digambarkan mulai dari pusat massa atau dari titik acuan lain seperti pusat geometri. Untuk pembelajaran dasar, pusat massa dipilih karena memiliki makna fisik yang jelas dan mudah dihitung.

Namun, perlu dicatat bahwa vektor dipol molekul netral tidak bergantung pada pemilihan titik asal koordinat jika jumlah muatan total nol. Secara matematis, jika total muatan molekul nol, pemindahan titik asal tidak mengubah momen dipol total. Akan tetapi, dalam praktik pembelajaran, menggunakan pusat massa sebagai acuan membantu visualisasi menjadi lebih teratur.

Dengan demikian, pusat massa dalam Praktikum 5 memiliki dua fungsi:

1. **Fungsi geometri**, yaitu menunjukkan pusat massa molekul.
2. **Fungsi visualisasi**, yaitu menjadi titik awal yang nyaman untuk menggambar vektor dipol.

4. Input Koordinat Molekul

Input koordinat molekul adalah bagian pertama kode Python. Koordinat dapat diperoleh dari beberapa sumber:

1. File XYZ dari Avogadro.

2. Koordinat hasil optimasi ChemCompute.
3. Output ORCA atau Gaussian.
4. Data koordinat yang dimasukkan manual oleh mahasiswa.

Format koordinat yang digunakan adalah koordinat Cartesian:

Atom	x	y	z
O	0.000	0.000	0.000
H	0.758	0.000	0.504
H	-0.758	0.000	0.504

Dalam kode Python, koordinat dapat disimpan sebagai daftar dictionary:

```
molekul = [
    {"atom": "O", "x": 0.000, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.834},
    {"atom": "H", "x": 0.758, "y": 0.000, "z": 0.504, "q": 0.417},
    {"atom": "H", "x": -0.758, "y": 0.000, "z": 0.504, "q": 0.417},
]
```

Nilai q adalah muatan parsial. Dalam praktikum, nilai muatan parsial dapat berasal dari output perhitungan atau dari model latihan yang dinyatakan secara eksplisit. Jika muatan parsial berasal dari output software, mahasiswa harus mencatat metode muatan yang digunakan. Jika muatan hanya nilai latihan, mahasiswa harus menuliskan bahwa data tersebut adalah data model, bukan hasil kuantum final.

5. Muatan Parsial dan Keterbatasannya

Muatan parsial adalah cara menyederhanakan distribusi elektron dalam molekul menjadi nilai muatan pada setiap atom. Dalam realitas kuantum, elektron tidak berada sebagai titik-titik muatan yang melekat pada atom, tetapi tersebar dalam distribusi kontinu. Oleh karena itu, muatan parsial adalah model interpretatif.

Dalam perhitungan kimia komputasi, muatan parsial dapat diperoleh melalui berbagai skema. Setiap skema memiliki asumsi dan hasil yang dapat berbeda. Karena itu, mahasiswa harus memahami bahwa muatan parsial bukan nilai absolut yang berdiri sendiri.

Dalam Praktikum 5, muatan parsial digunakan untuk tujuan pembelajaran:

```
muatan parsial + koordinat
→ vektor dipol sederhana
→ pemahaman resultan vektor
```

Kelebihan pendekatan ini adalah mudah dipahami. Mahasiswa dapat melihat bagaimana muatan positif dan negatif pada posisi berbeda menghasilkan vektor dipol. Keterbatasannya adalah nilai yang diperoleh belum tentu sama dengan momen dipol kuantum dari ChemCompute, ORCA, atau Gaussian.

Oleh karena itu, laporan harus menulis dengan hati-hati:

Vektor dipol sederhana dihitung dengan Python berdasarkan koordinat atom dan muatan parsial. Hasil ini digunakan untuk memahami arah dan kecenderungan polaritas, sedangkan nilai momen dipol kuantum dibandingkan dengan output ChemCompute.

Pernyataan seperti ini lebih tepat daripada:

Python menghitung momen dipol molekul secara kuantum.

Pernyataan kedua salah karena Python dalam praktikum ini tidak menghitung distribusi elektron kuantum.

6. Penentuan Polar atau Nonpolar Berdasarkan Ambang Dipol

Dalam kode Python, molekul dapat diklasifikasikan sebagai polar atau nonpolar berdasarkan besar momen dipol. Untuk keperluan praktikum, dapat digunakan ambang sederhana. Misalnya:

Jika $\mu_{\text{total}} < 0,05 \text{ D} \rightarrow \text{nonpolar atau mendekati nonpolar}$

Jika $\mu_{\text{total}} \geq 0,05 \text{ D} \rightarrow \text{polar}$

Ambang ini hanya digunakan sebagai kriteria praktikum. Nilai ambang dapat disesuaikan oleh dosen. Dalam perhitungan numerik, molekul yang secara teori nonpolar kadang menghasilkan nilai sangat kecil karena ketidaksempurnaan koordinat, pembulatan, atau muatan parsial yang tidak sepenuhnya simetris. Oleh karena itu, nilai sangat kecil tidak langsung berarti molekul benar-benar polar.

Contoh:

CO₂ ideal
 $\rightarrow \mu \approx 0 \text{ D}$
 $\rightarrow \text{nonpolar}$

Jika hasil Python menunjukkan $\mu = 0,002 \text{ D}$,
 nilai tersebut dapat dianggap mendekati nol
 jika struktur dan muatan simetris.

Sebaliknya, jika H₂O menghasilkan momen dipol tidak nol, hasil tersebut sesuai dengan bentuk bengkoknya. Klasifikasi polar/nonpolar harus selalu diperiksa bersama teori simetri.

7. Tabel Klasifikasi Kelompok Titik Manual

Kode Python dalam Praktikum 5 juga memuat tabel klasifikasi kelompok titik secara manual berbasis data mahasiswa. Artinya, Python tidak secara otomatis menentukan kelompok titik dari koordinat. Mahasiswa tetap harus melakukan analisis simetri secara manual atau berbantuan symmetry tools, kemudian memasukkan hasilnya ke tabel.

Contoh tabel manual:

Molekul	Kelompok Titik	Bentuk	Polaritas Teoretis
H ₂ O	C _{2v}	Bengkok	Polar
NH ₃	C _{3v}	Piramidal trigonal	Polar
BF ₃	D _{3h}	Trigonal planar	Nonpolar
CH ₄	T ^d	Tetrahedral	Nonpolar
CO ₂	D _{∞h}	Linear	Nonpolar
C ₂ H ₄	D _{2h}	Planar	Nonpolar
Benzena	D _{6h}	Planar aromatik	Nonpolar

Mengapa tabel ini dimasukkan secara manual? Karena penentuan kelompok titik membutuhkan pemahaman unsur simetri. Jika semuanya diotomatisasi, mahasiswa dapat kehilangan kesempatan belajar. Praktikum ini menuntut mahasiswa menjelaskan mengapa H₂O termasuk C_{2v}, mengapa BF₃ termasuk D_{3h}, dan mengapa benzena termasuk D_{6h}. Python hanya membantu menyusun dan menyimpan hasil klasifikasi.

8. Struktur Kode Python yang Dianjurkan

Kode Python Praktikum 5 sebaiknya disusun secara modular. Artinya, setiap bagian memiliki fungsi yang jelas. Struktur yang dianjurkan adalah:

1. Impor pustaka
2. Definisi massa atom
3. Definisi konstanta konversi
4. Input data molekul
5. Fungsi menghitung pusat massa
6. Fungsi menghitung vektor dipol
7. Fungsi klasifikasi polar/nonpolar
8. Fungsi visualisasi vektor dipol
9. Pembuatan tabel hasil
10. Penyimpanan CSV
11. Pembuatan grafik batang momen dipol

Struktur ini membuat kode mudah dibaca, diperbaiki, dan digunakan ulang. Dalam praktikum akademik, kode yang baik bukan hanya kode yang berjalan, tetapi kode yang terstruktur dan dapat dipahami.

9. Contoh Kode Python Jalur Mandiri

Kode berikut adalah contoh kerangka lengkap untuk Praktikum 5. Data koordinat dan muatan parsial di dalam kode bersifat **contoh latihan**. Mahasiswa harus mengganti koordinat dan muatan dengan data hasil praktikum atau data yang ditetapkan oleh dosen.

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path

# =====
# PRAKTIKUM 5: SIMETRI MOLEKUL, KELOMPOK TITIK,
# DAN MOMEN DIPOL
# Jalur Python Mandiri
# =====

# Catatan:
# Data koordinat dan muatan parsial di bawah adalah contoh latihan.
# Untuk laporan final, ganti dengan data hasil praktikum atau data
# yang ditetapkan oleh dosen.

# -----
# 1. Konstanta dan data massa atom
# -----

E_ANGSTROM_TO_DEBYE = 4.80320427

massa_atom = {
    "H": 1.008,
    "B": 10.81,
    "C": 12.011,
    "N": 14.007,
    "O": 15.999,
    "F": 18.998,
}

# -----
# 2. Data molekul
# -----
# Format:
# "koordinat" berisi daftar atom dengan x, y, z dalam Angstrom
# dan q sebagai muatan parsial dalam satuan e.

molekul_data = {
    "H2O": {
        "nama": "H2O",
        "bentuk": "Bengkok",
        "kelompok_titik": "C2v",
        "polaritas_teoris": "Polar",
        "koordinat": [
            {"atom": "O", "x": 0.000, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.834},
            {"atom": "H", "x": 0.758, "y": 0.000, "z": 0.504, "q": 0.417},
            {"atom": "H", "x": -0.758, "y": 0.000, "z": 0.504, "q": 0.417},
        ],
    },
}
```

```

},
"CO2": {
  "nama": "CO2",
  "bentuk": "Linear",
  "kelompok_titik": "D∞h",
  "polaritas_teoris": "Nonpolar",
  "koordinat": [
    {"atom": "O", "x": -1.160, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.35},
    {"atom": "C", "x": 0.000, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": 0.70},
    {"atom": "O", "x": 1.160, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.35},
  ],
},
"BF3": {
  "nama": "BF3",
  "bentuk": "Trigonal planar",
  "kelompok_titik": "D3h",
  "polaritas_teoris": "Nonpolar",
  "koordinat": [
    {"atom": "B", "x": 0.000, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": 0.90},
    {"atom": "F", "x": 1.300, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.30},
    {"atom": "F", "x": -0.650, "y": 1.126, "z": 0.000, "q": -0.30},
    {"atom": "F", "x": -0.650, "y": -1.126, "z": 0.000, "q": -0.30},
  ],
},
"NH3": {
  "nama": "NH3",
  "bentuk": "Piramidal trigonal",
  "kelompok_titik": "C3v",
  "polaritas_teoris": "Polar",
  "koordinat": [
    {"atom": "N", "x": 0.000, "y": 0.000, "z": 0.200, "q": -0.90},
    {"atom": "H", "x": 0.940, "y": 0.000, "z": -0.200, "q": 0.30},
    {"atom": "H", "x": -0.470, "y": 0.814, "z": -0.200, "q": 0.30},
    {"atom": "H", "x": -0.470, "y": -0.814, "z": -0.200, "q": 0.30},
  ],
},
"CH4": {
  "nama": "CH4",
  "bentuk": "Tetrahedral",
  "kelompok_titik": "Td",
  "polaritas_teoris": "Nonpolar",
  "koordinat": [
    {"atom": "C", "x": 0.000, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.40},
    {"atom": "H", "x": 0.629, "y": 0.629, "z": 0.629, "q": 0.10},
    {"atom": "H", "x": -0.629, "y": -0.629, "z": 0.629, "q": 0.10},
    {"atom": "H", "x": -0.629, "y": 0.629, "z": -0.629, "q": 0.10},
    {"atom": "H", "x": 0.629, "y": -0.629, "z": -0.629, "q": 0.10},
  ],
},
"C2H4": {
  "nama": "C2H4",
  "bentuk": "Planar",
  "kelompok_titik": "D2h",
  "polaritas_teoris": "Nonpolar",
  "koordinat": [
    {"atom": "C", "x": -0.670, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.20},

```

```

        {"atom": "C", "x": 0.670, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.20},
        {"atom": "H", "x": -1.230, "y": 0.930, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": -1.230, "y": -0.930, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": 1.230, "y": 0.930, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": 1.230, "y": -0.930, "z": 0.000, "q": 0.10},
    ],
},
"C6H6": {
    "nama": "Benzena",
    "bentuk": "Planar aromatik",
    "kelompok_titik": "D6h",
    "polaritas_teoris": "Nonpolar",
    "koordinat": [
        {"atom": "C", "x": 1.397, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.10},
        {"atom": "C", "x": 0.699, "y": 1.210, "z": 0.000, "q": -0.10},
        {"atom": "C", "x": -0.699, "y": 1.210, "z": 0.000, "q": -0.10},
        {"atom": "C", "x": -1.397, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": -0.10},
        {"atom": "C", "x": -0.699, "y": -1.210, "z": 0.000, "q": -0.10},
        {"atom": "C", "x": 0.699, "y": -1.210, "z": 0.000, "q": -0.10},
        {"atom": "H", "x": 2.479, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": 1.240, "y": 2.147, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": -1.240, "y": 2.147, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": -2.479, "y": 0.000, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": -1.240, "y": -2.147, "z": 0.000, "q": 0.10},
        {"atom": "H", "x": 1.240, "y": -2.147, "z": 0.000, "q": 0.10},
    ],
},
}

```

```

# -----
# 3. Fungsi menghitung pusat massa
# -----

```

```

def hitung_pusat_massa(koordinat):
    total_massa = 0.0
    jumlah = np.zeros(3)

    for atom in koordinat:
        simbol = atom["atom"]
        massa = massa_atom[simbol]
        posisi = np.array([atom["x"], atom["y"], atom["z"]], dtype=float)

        total_massa += massa
        jumlah += massa * posisi

    return jumlah / total_massa

```

```

# -----
# 4. Fungsi menghitung vektor dipol sederhana
# -----

```

```

def hitung_vektor_dipol(koordinat):
    dipol_e_angstrom = np.zeros(3)

    for atom in koordinat:
        q = atom["q"]
        posisi = np.array([atom["x"], atom["y"], atom["z"]], dtype=float)

```

```

        dipol_e_angstrom += q * posisi

    dipol_debye = dipol_e_angstrom * E_ANGSTROM_TO_DEBYE
    besar_debye = np.linalg.norm(dipol_debye)

    return dipol_debye, besar_debye

# -----
# 5. Fungsi klasifikasi polaritas
# -----

def klasifikasi_polaritas(mu_total, ambang=0.05):
    if mu_total < ambang:
        return "Nonpolar atau mendekati nonpolar"
    return "Polar"

# -----
# 6. Perhitungan semua molekul
# -----

hasil = []

for kode, data in molekul_data.items():
    koordinat = data["koordinat"]

    pusat_massa = hitung_pusat_massa(koordinat)
    dipol_vec, dipol_total = hitung_vektor_dipol(koordinat)
    polaritas_python = klasifikasi_polaritas(dipol_total)

    hasil.append({
        "kode": kode,
        "molekul": data["nama"],
        "bentuk": data["bentuk"],
        "kelompok_titik": data["kelompok_titik"],
        "polaritas_teoris": data["polaritas_teoris"],
        "pusat_massa_x": pusat_massa[0],
        "pusat_massa_y": pusat_massa[1],
        "pusat_massa_z": pusat_massa[2],
        "mu_x_D": dipol_vec[0],
        "mu_y_D": dipol_vec[1],
        "mu_z_D": dipol_vec[2],
        "mu_total_D": dipol_total,
        "polaritas_python": polaritas_python,
    })

df_hasil = pd.DataFrame(hasil)

# -----
# 7. Menyimpan output
# -----

output_dir = Path("output_praktikum_05")
output_dir.mkdir(exist_ok=True)

csv_path = output_dir / "tabel_simetri_momen_dipol.csv"
df_hasil.to_csv(csv_path, index=False)

```

```

print("Tabel hasil analisis:")
print(df_hasil.to_string(index=False))
print(f"\nFile CSV disimpan sebagai: {csv_path}")

# -----
# 8. Grafik batang momen dipol
# -----

plt.figure(figsize=(9, 5))
plt.bar(df_hasil["molekul"], df_hasil["mu_total_D"])
plt.xlabel("Molekul")
plt.ylabel("Momen Dipol Total (Debye)")
plt.title("Grafik Batang Momen Dipol Molekul Model")
plt.xticks(rotation=30, ha="right")
plt.tight_layout()

grafik_path = output_dir / "grafik_momen_dipol.png"
plt.savefig(grafik_path, dpi=300)
plt.show()

print(f"Grafik momen dipol disimpan sebagai: {grafik_path}")

# -----
# 9. Visualisasi vektor dipol untuk satu molekul
# -----
# Contoh: H2O. Mahasiswa dapat mengganti menjadi CO2, NH3, dll.

pilihan = "H2O"
data = molekul_data[pilihan]
koordinat = data["koordinat"]

pusat_massa = hitung_pusat_massa(koordinat)
dipol_vec, dipol_total = hitung_vektor_dipol(koordinat)

fig = plt.figure(figsize=(7, 6))
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")

# Plot atom
for atom in koordinat:
    ax.scatter(atom["x"], atom["y"], atom["z"], s=80)
    ax.text(atom["x"], atom["y"], atom["z"], atom["atom"])

# Plot pusat massa
ax.scatter(
    pusat_massa[0],
    pusat_massa[1],
    pusat_massa[2],
    s=120,
    marker="x",
)

ax.text(
    pusat_massa[0],
    pusat_massa[1],
    pusat_massa[2],
    "Pusat massa",
)

```



```
# Plot vektor dipol dari pusat massa
skala = 0.15
ax.quiver(
    pusat_massa[0],
    pusat_massa[1],
    pusat_massa[2],
    dipol_vec[0] * skala,
    dipol_vec[1] * skala,
    dipol_vec[2] * skala,
    linewidth=2,
)

ax.set_xlabel("x (Å)")
ax.set_ylabel("y (Å)")
ax.set_zlabel("z (Å)")
ax.set_title(f"Visualisasi Vektor Dipol {data['nama']}")

plt.tight_layout()

vektor_path = output_dir / f"visualisasi_vektor_dipol_{pilihan}.png"
plt.savefig(vektor_path, dpi=300)
plt.show()

print(f"Visualisasi vektor dipol disimpan sebagai: {vektor_path}")
print(f"Momen dipol {data['nama']} = {dipol_total:.4f} D")
```

Kode tersebut menghasilkan beberapa output penting:

1. Tabel molekul, kelompok titik, dan momen dipol.
2. Klasifikasi polar/nonpolar.
3. File CSV hasil analisis.
4. Grafik batang momen dipol.
5. Visualisasi vektor dipol untuk molekul tertentu.

Mahasiswa harus memahami bahwa data contoh dalam kode dapat diganti. Nilai muatan parsial dan koordinat harus disesuaikan dengan hasil praktikum atau instruksi dosen.

10. Penjelasan Bagian Kode

Bagian pertama kode mengimpor pustaka:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path
```

`numpy` digunakan untuk perhitungan vektor. `pandas` digunakan untuk membuat tabel dan menyimpan CSV. `matplotlib` digunakan untuk membuat grafik dan visualisasi. `Path` digunakan untuk membuat folder output secara rapi.

Bagian berikutnya mendefinisikan konstanta konversi:

```
E_ANGSTROM_TO_DEBYE = 4.80320427
```

Konstanta ini mengubah satuan $\text{e}\text{\AA}$ menjadi Debye. Penggunaan satuan penting karena momen dipol umumnya dilaporkan dalam Debye.

Bagian massa atom:

```
massa_atom = {
    "H": 1.008,
    "B": 10.81,
    "C": 12.011,
    "N": 14.007,
    "O": 15.999,
    "F": 18.998,
}
```

Massa atom digunakan untuk menghitung pusat massa. Jika molekul lain ditambahkan, massa atomnya harus ditambahkan ke dictionary.

Bagian data molekul memuat nama molekul, bentuk, kelompok titik, polaritas teoretis, koordinat, dan muatan parsial. Bagian ini penting karena menjadi sumber utama analisis. Jika data salah, seluruh hasil akan salah.

11. Fungsi Pusat Massa

Fungsi pusat massa:

```
def hitung_pusat_massa(koordinat):
    total_massa = 0.0
    jumlah = np.zeros(3)

    for atom in koordinat:
        simbol = atom["atom"]
        massa = massa_atom[simbol]
        posisi = np.array([atom["x"], atom["y"], atom["z"]], dtype=float)

        total_massa += massa
        jumlah += massa * posisi

    return jumlah / total_massa
```

Fungsi ini membaca setiap atom, mengambil massa atom, mengambil posisi koordinat, lalu menghitung rata-rata berbobot massa. Hasilnya adalah vektor pusat massa (x, y, z) .

Dalam visualisasi, pusat massa digunakan sebagai titik awal vektor dipol. Dengan demikian, mahasiswa dapat melihat arah dipol terhadap posisi molekul.

12. Fungsi Vektor Dipol

Fungsi vektor dipol:

```
def hitung_vektor_dipol(koordinat):
    dipol_e_angstrom = np.zeros(3)

    for atom in koordinat:
        q = atom["q"]
        posisi = np.array([atom["x"], atom["y"], atom["z"]], dtype=float)
        dipol_e_angstrom += q * posisi

    dipol_debye = dipol_e_angstrom * E_ANGSTROM_TO_DEBYE
    besar_debye = np.linalg.norm(dipol_debye)

    return dipol_debye, besar_debye
```

Fungsi ini menjumlahkan kontribusi $q_i \cdot r_i$ dari setiap atom. Hasilnya adalah vektor dipol dalam eÅ, kemudian dikonversi menjadi Debye. Besar vektor dihitung dengan norma Euclidean.

Secara konseptual, fungsi ini memperlihatkan bahwa momen dipol adalah hasil penjumlahan vektor. Jika kontribusi muatan tersusun simetris, hasilnya mendekati nol. Jika tidak simetris, hasilnya tidak nol.

13. Fungsi Klasifikasi Polaritas

Fungsi klasifikasi polaritas:

```
def klasifikasi_polaritas(mu_total, ambang=0.05):
    if mu_total < ambang:
        return "Nonpolar atau mendekati nonpolar"
    return "Polar"
```

Fungsi ini menggunakan ambang sederhana. Jika momen dipol lebih kecil dari ambang, molekul diklasifikasikan nonpolar atau mendekati nonpolar. Jika lebih besar, molekul diklasifikasikan polar.

Ambang ini harus dipahami sebagai alat praktikum. Dalam analisis ilmiah yang lebih ketat, klasifikasi polaritas perlu mempertimbangkan nilai momen dipol kuantum, simetri molekul, dan toleransi numerik. Namun, untuk tujuan pembelajaran, fungsi ini membantu mahasiswa menghubungkan angka dengan klasifikasi.

14. Output Tabel Hasil Analisis

Kode menghasilkan tabel seperti berikut:

Molekul	Bentuk	Kelompok Titik	μ_x	μ_y	μ_z	μ Total	Polaritas Python
H ₂ O	Bengkok	C _{2v}	...	...	...	...	Polar
NH ₃	Piramidal trigonal	C _{3v}	...	...	...	...	Polar
BF ₃	Trigonal planar	D _{3h}	...	...	...	...	Nonpolar
CH ₄	Tetrahedral	T ^d	...	...	...	...	Nonpolar
CO ₂	Linear	D _{∞h}	...	...	...	...	Nonpolar
C ₂ H ₄	Planar	D _{2h}	...	...	...	...	Nonpolar
Benzena	Planar aromatik	D _{6h}	...	...	...	...	Nonpolar

Tabel ini menjadi dasar analisis. Mahasiswa harus membandingkan hasil Python dengan teori simetri. Jika hasil Python berbeda dari teori, mahasiswa harus memeriksa koordinat, muatan parsial, dan simetri data input.

Contoh:

Jika CO₂ ideal menghasilkan μ mendekati nol,
maka hasil tersebut konsisten dengan struktur linear D_{∞h}.

Jika CO₂ menghasilkan μ besar,
maka kemungkinan struktur atau muatan parsial tidak simetris.

15. Visualisasi Vektor Dipol

Visualisasi vektor dipol membantu mahasiswa memahami arah momen dipol. Dalam kode, visualisasi dilakukan dengan plot tiga dimensi. Atom ditampilkan sebagai titik, pusat massa ditampilkan sebagai tanda, dan vektor dipol digambar dari pusat massa.

Visualisasi ini penting terutama untuk molekul polar seperti H₂O dan NH₃. Pada H₂O, vektor dipol total seharusnya mengarah ke sisi oksigen atau sepanjang arah resultan polaritas molekul, bergantung konvensi arah vektor yang digunakan dalam model muatan. Pada NH₃, vektor dipol total berada sepanjang sumbu simetri C₃.

Untuk molekul nonpolar seperti CO₂, BF₃, CH₄, C₂H₄, dan benzena, vektor dipol total seharusnya sangat kecil atau tidak tampak signifikan jika input benar-benar simetris.

Visualisasi membantu mahasiswa membedakan dua hal:

1. **Molekul polar**, vektor dipol terlihat jelas.
2. **Molekul nonpolar**, vektor dipol sangat kecil atau mendekati nol.

Namun, visualisasi juga harus ditafsirkan hati-hati. Skala panah dapat membuat vektor kecil tampak besar jika diperbesar. Oleh karena itu, visualisasi harus selalu disertai nilai numerik momen dipol.

16. Grafik Batang Momen Dipol

Grafik batang momen dipol digunakan untuk membandingkan besar momen dipol antar molekul. Molekul polar seperti H_2O dan NH_3 diharapkan memiliki batang lebih tinggi, sedangkan molekul nonpolar seperti BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena diharapkan memiliki batang mendekati nol.

Grafik ini memiliki fungsi pedagogis yang kuat. Mahasiswa dapat melihat pola umum:

molekul bengkok atau piramidal
→ momen dipol tidak nol

molekul linear, trigonal planar, tetrahedral, atau planar sangat simetris
→ momen dipol nol atau mendekati nol

Namun, grafik tidak boleh menjadi satu-satunya dasar kesimpulan. Grafik harus dibaca bersama kelompok titik dan struktur molekul. Jika grafik menunjukkan BF_3 memiliki momen dipol besar, mahasiswa harus curiga dan memeriksa input.

17. Hubungan Hasil Python dengan Hasil ChemCompute

Hasil Python perlu dibandingkan dengan hasil ChemCompute. Perbandingan ini penting karena keduanya berasal dari pendekatan yang berbeda.

Aspek	ChemCompute	Python
Sumber data	Perhitungan struktur elektronik	Koordinat dan muatan parsial
Distribusi muatan	Elektron kuantum	Muatan titik
Output	Momen dipol kuantum	Vektor dipol sederhana
Fungsi pembelajaran	Hasil komputasi	Pemahaman konsep vektor
Keterbatasan	Bergantung metode dan basis set	Bergantung muatan parsial

Jika hasil keduanya konsisten secara pola, misalnya H_2O dan NH_3 polar sedangkan CO_2 dan BF_3 nonpolar, maka mahasiswa dapat menyimpulkan bahwa pemahaman simetri dan vektor dipolnya baik. Jika tidak konsisten, mahasiswa harus menganalisis penyebabnya.

Kemungkinan penyebab perbedaan:

1. Muatan parsial tidak simetris.
2. Koordinat tidak ideal.
3. Struktur belum teroptimasi.

4. Skema muatan parsial berbeda.
5. Model Python terlalu sederhana.
6. Kesalahan input data.

Perbedaan hasil tidak selalu berarti salah. Dalam sains komputasi, perbedaan dapat menjadi bahan analisis. Yang penting adalah mahasiswa mampu menjelaskan penyebabnya secara rasional.

18. Contoh Analisis Hasil Python

Contoh analisis untuk H₂O:

Hasil Python menunjukkan bahwa H₂O memiliki momen dipol tidak nol. Hal ini konsisten dengan bentuk bengkok H₂O dan kelompok titik C_{2v}. Dua ikatan O-H bersifat polar dan vektornya tidak saling meniadakan. Oleh karena itu, H₂O diklasifikasikan sebagai molekul polar.

Contoh analisis untuk CO₂:

Hasil Python menunjukkan bahwa CO₂ memiliki momen dipol mendekati nol. Hal ini sesuai dengan bentuk linear O=C=O dan kelompok titik D_{∞h}. Dua vektor dipol C=O tersusun sama besar dan berlawanan arah sehingga resultannya nol.

Contoh analisis untuk BF₃:

BF₃ memiliki tiga ikatan B-F yang polar, tetapi hasil Python menunjukkan momen dipol mendekati nol. Hal ini terjadi karena tiga vektor dipol B-F tersusun simetris dalam geometri trigonal planar. Dengan demikian, hasil Python konsisten dengan kelompok titik D_{3h} dan sifat nonpolar BF₃.

Contoh analisis untuk NH₃:

NH₃ memiliki bentuk piramidal trigonal dan kelompok titik C_{3v}. Hasil Python menunjukkan momen dipol tidak nol karena vektor dipol N-H tidak saling meniadakan. Arah resultan dipol berada sepanjang sumbu simetri molekul.

19. Validasi Input Python

Sebelum menjalankan kode, mahasiswa harus memvalidasi input. Validasi input meliputi:

Aspek	Pertanyaan Validasi
Koordinat	Apakah koordinat sesuai struktur molekul?
Atom	Apakah semua atom lengkap?
Muatan parsial	Apakah total muatan sesuai muatan molekul?
Satuan koordinat	Apakah koordinat dalam Ångström?
Kelompok titik	Apakah dimasukkan sesuai analisis manual?

Bentuk molekul	Apakah bentuk sesuai teori?
Simetri	Apakah data simetris untuk molekul nonpolar?
Nama molekul	Apakah tidak tertukar?

Khusus muatan parsial, total muatan harus sesuai muatan molekul. Untuk molekul netral, jumlah muatan parsial harus mendekati nol.

Contoh pemeriksaan:

$$\text{H}_2\text{O}: \\ q(\text{O}) + q(\text{H}) + q(\text{H}) = -0,834 + 0,417 + 0,417 = 0$$

Jika total muatan tidak nol padahal molekul netral, hasil momen dipol dapat bergantung pada titik asal koordinat dan menjadi kurang valid untuk pembelajaran.

20. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum dalam jalur Python mandiri adalah:

Kesalahan	Dampak
Salah memasukkan koordinat	Arah dan besar dipol salah
Muatan parsial tidak netral	Hasil bergantung titik asal
Satuan koordinat campur aduk	Nilai momen dipol salah
Tidak mengonversi eÅ ke Debye	Satuan output salah
Menganggap Python menghitung DFT	Kesalahan metodologis
Kelompok titik dimasukkan tanpa analisis	Pemahaman simetri lemah
Mengabaikan visualisasi	Arah dipol tidak dipahami
Menafsirkan nilai kecil sebagai polar tanpa validasi	Salah membaca toleransi
Tidak membandingkan dengan ChemCompute	Analisis tidak lengkap
Tidak menyimpan CSV	Reprodusibilitas lemah

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari agar jalur Python benar-benar membantu pembelajaran, bukan menambah kebingungan.

21. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki implikasi pedagogis yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa momen dipol adalah vektor, bukan hanya angka. Mereka melihat komponen μ_x , μ_y , μ_z , dan besar totalnya. Kedua, mahasiswa belajar bahwa polaritas molekul muncul dari resultan vektor, bukan hanya dari adanya ikatan polar. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa simetri dapat meniadakan vektor dipol. Keempat, mahasiswa belajar bahwa data komputasi harus diolah dan disimpan secara

reproduksibel. Kelima, mahasiswa belajar membedakan model sederhana dan perhitungan kuantum.

Secara konseptual, jalur Python memperkuat alur berpikir:

```
koordinat atom
→ distribusi muatan
→ vektor dipol
→ resultan dipol
→ polaritas
→ hubungan dengan simetri
```

Alur ini sangat penting karena menjadi dasar bagi banyak topik kimia lanjutan, seperti interaksi antarmolekul, kelarutan, spektrum IR, orientasi molekul dalam medan listrik, dan sifat material polar.

22. Transisi ke Nama File Kode

Subbab 8.6 telah menjelaskan jalur Python mandiri untuk Praktikum 5. Kode Python memuat input koordinat molekul, perhitungan pusat massa, perhitungan vektor dipol sederhana dari muatan parsial, klasifikasi polar atau nonpolar, visualisasi vektor dipol, serta tabel klasifikasi kelompok titik secara manual berdasarkan data mahasiswa. Jalur ini melengkapi hasil ChemCompute dengan pemahaman vektorial yang lebih eksplisit.

Subbab berikutnya akan membahas nama file kode. Penamaan file penting agar kode Praktikum 5 mudah dikenali, mudah dikumpulkan, mudah diperiksa, dan mendukung reproduksibilitas. Dengan kode Python yang sudah dirancang pada subbab ini, mahasiswa perlu menyimpannya menggunakan nama file baku yang akan ditetapkan pada subbab 8.7.

8.7 Nama File Kode

Nama file kode untuk Praktikum 5 adalah:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Penamaan file kode dalam Praktikum 5 bukan sekadar urusan administratif. Nama file merupakan bagian dari tata kelola kerja ilmiah dalam kimia komputasi. File kode menjadi pusat analisis jalur Python mandiri yang telah dibahas pada subbab 8.6. Di dalam file tersebut terdapat input koordinat molekul, data muatan parsial, perhitungan pusat massa, perhitungan vektor dipol sederhana, klasifikasi polar atau nonpolar, visualisasi vektor dipol, tabel kelompok titik, grafik batang momen dipol, dan penyimpanan hasil dalam CSV. Karena file ini memegang peran penting, namanya harus jelas, baku, konsisten, dan mudah dikenali.

Nama `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` memuat empat unsur utama. Pertama, kata `praktikum` menunjukkan bahwa file ini merupakan bagian dari kegiatan praktikum, bukan kode

bebas yang tidak terikat dengan struktur buku. Kedua, angka 05 menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 5. Ketiga, frasa `simetri_momen_dipol` menunjukkan fokus isi kode, yaitu analisis simetri molekul dan momen dipol. Keempat, ekstensi `.py` menunjukkan bahwa file tersebut merupakan file Python.

Dengan demikian, nama file tersebut menjawab tiga pertanyaan penting:

1. File ini digunakan untuk kegiatan apa?
2. File ini berhubungan dengan topik apa?
3. File ini ditulis dalam format apa?

Jawabannya jelas:

<code>praktikum_05</code>	→ Praktikum ke-5
<code>simetri_momen_dipol</code>	→ Topik simetri molekul dan momen dipol
<code>.py</code>	→ File kode Python

Penamaan seperti ini penting karena Praktikum 5 menghasilkan banyak file: struktur awal, output ChemCompute, output ORCA atau Gaussian, data CSV, gambar visualisasi vektor dipol, grafik batang, dan laporan praktikum. Jika nama file kode tidak jelas, hubungan antara data, kode, output, dan laporan menjadi sulit ditelusuri. Dalam kerja ilmiah, keterlacakan seperti ini merupakan bagian dari reproduktibilitas.

1. Makna Nama File dalam Praktikum Kimia Komputasi

Dalam praktikum kimia komputasi, nama file berfungsi sebagai identitas ilmiah. File bukan hanya benda digital yang disimpan di folder, tetapi bagian dari bukti proses kerja. Setiap file harus dapat menjelaskan dirinya sendiri melalui nama yang ringkas dan informatif.

File `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` menunjukkan bahwa file tersebut adalah kode Python untuk Praktikum 5. Ketika dosen, mahasiswa lain, atau pembaca laporan melihat nama file ini, mereka dapat langsung menduga isi dan fungsinya tanpa harus membuka file terlebih dahulu.

Dalam Praktikum 5, file ini berhubungan dengan rangkaian kerja berikut:

```
struktur molekul
→ koordinat atom
→ muatan parsial
→ pusat massa
→ vektor dipol
→ klasifikasi polar/nonpolar
→ tabel kelompok titik
→ grafik dan visualisasi
→ laporan praktikum
```

File kode berada di tengah alur tersebut. Ia mengubah data koordinat dan muatan parsial menjadi hasil analisis yang dapat dibaca, divisualisasikan, dan dimasukkan ke laporan. Karena itu, nama file harus cukup spesifik agar tidak tertukar dengan kode praktikum lain.

Nama yang terlalu umum seperti:

```
kode.py
analisis.py
momen.py
praktikum.py
simetri.py
```

tidak dianjurkan karena tidak menjelaskan nomor praktikum, topik lengkap, atau kedudukan file dalam rangkaian buku. Sebaliknya, nama `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` lebih lengkap dan terarah.

2. Alasan Menggunakan Angka 05

Angka 05 menunjukkan bahwa file tersebut digunakan untuk Praktikum 5. Penulisan dua digit lebih dianjurkan daripada satu digit karena menjaga urutan file tetap rapi ketika semua praktikum dikumpulkan dalam satu folder.

Perhatikan perbandingan berikut:

```
praktikum_1.py
praktikum_2.py
praktikum_10.py
```

Dalam pengurutan alfabetis tertentu, `praktikum_10.py` dapat muncul sebelum `praktikum_2.py`, sehingga urutan file menjadi tidak nyaman dibaca. Dengan penulisan dua digit, urutannya menjadi lebih tertib:

```
praktikum_01_pengantar.py
praktikum_02_struktur_molekul.py
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Penulisan 05 juga menunjukkan kesinambungan dengan praktikum sebelumnya. Praktikum 4 menggunakan nama file:

```
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
```

Maka Praktikum 5 menggunakan nama:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Konsistensi ini membuat rangkaian buku praktikum menjadi tertata. Mahasiswa dapat melihat bahwa setiap praktikum memiliki kode Python sendiri dengan nama yang mengikuti pola yang sama.

3. Alasan Menggunakan Frasa `simetri_momen_dipol`

Frasa `simetri_momen_dipol` dipilih karena mewakili inti Praktikum 5. Praktikum ini tidak hanya membahas simetri molekul, dan tidak hanya membahas momen dipol. Inti pembelajarannya adalah hubungan antara keduanya.

Jika file hanya diberi nama:

```
praktikum_05_simetri.py
```

maka nama tersebut belum menunjukkan bahwa kode juga menghitung dan memvisualisasikan momen dipol.

Jika file hanya diberi nama:

```
praktikum_05_momen_dipol.py
```

maka nama tersebut belum menunjukkan bahwa klasifikasi kelompok titik dan simetri molekul juga menjadi bagian penting.

Nama yang lebih lengkap adalah:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Nama ini menunjukkan bahwa file memuat dua komponen utama:

Komponen Nama	Makna
<code>simetri</code>	Berhubungan dengan bentuk, unsur simetri, dan kelompok titik
<code>momen_dipol</code>	Berhubungan dengan vektor dipol, besar dipol, dan polaritas

Dengan demikian, nama file langsung mencerminkan tujuan Praktikum 5, yaitu menghubungkan simetri molekul dengan momen dipol.

4. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama file menggunakan huruf kecil dan garis bawah:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Pola ini lebih baik daripada menggunakan spasi, huruf kapital tidak konsisten, atau tanda baca yang tidak perlu.

Nama yang sebaiknya dihindari:

```
Praktikum 05 Simetri Momen Dipol.py
Praktikum_05_Simetri_Momen_Dipol.py
praktikum 05 simetri momen dipol.py
praktikum-05-simetri-momen-dipol.py
praktikum05simetrimomendipol.py
```

Alasan penggunaan huruf kecil dan garis bawah adalah:

1. **Mudah dipanggil melalui terminal.**
2. **Aman pada berbagai sistem operasi.**
3. **Tidak menimbulkan masalah akibat spasi.**
4. **Mudah dibaca manusia.**
5. **Konsisten dengan gaya penamaan file Python.**

Jika file bernama:

```
Praktikum 05 Simetri Momen Dipol.py
```

maka pemanggilan melalui terminal dapat menjadi kurang nyaman karena ada spasi. Mahasiswa mungkin harus menggunakan tanda kutip:

```
python "Praktikum 05 Simetri Momen Dipol.py"
```

Sebaliknya, jika nama file menggunakan garis bawah, pemanggilan menjadi lebih sederhana:

```
python praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Kerapian semacam ini tampak teknis, tetapi sangat penting dalam praktikum komputasi.

5. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python

Ekstensi `.py` menunjukkan bahwa file tersebut adalah file Python. Ekstensi ini wajib dipertahankan. Jika ekstensi dihapus atau berubah, sistem operasi dan interpreter Python dapat kesulitan mengenali file sebagai kode Python.

Nama yang benar:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Nama yang salah atau kurang tepat:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.txt
praktikum_05_simetri_momen_dipol.docx
praktikum_05_simetri_momen_dipol.pdf
praktikum_05_simetri_momen_dipol
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py.txt
```

Kesalahan `py.txt` sering terjadi ketika sistem operasi menyembunyikan ekstensi file. Mahasiswa mungkin mengira sudah membuat file `.py`, padahal sebenarnya file tersebut masih berupa teks biasa dengan ekstensi ganda. Karena itu, sebelum mengumpulkan tugas, mahasiswa harus memeriksa bahwa file benar-benar berakhiran `.py`.

File dapat dijalankan melalui terminal dengan perintah:

```
python praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

atau pada beberapa sistem:

```
python3 praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Jika file tidak dapat dijalankan, mahasiswa perlu memeriksa apakah Python sudah terpasang, apakah direktori kerja sudah benar, dan apakah nama file diketik tepat.

6. Hubungan Nama File dengan Isi Kode

Nama file harus sesuai dengan isi kode. File `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` minimal harus memuat komponen berikut:

1. Identitas praktikum.
2. Impor pustaka Python.
3. Data massa atom.
4. Data koordinat molekul.
5. Data muatan parsial.
6. Data kelompok titik manual.
7. Fungsi perhitungan pusat massa.
8. Fungsi perhitungan vektor dipol.
9. Fungsi klasifikasi polar/nonpolar.
10. Tabel hasil analisis.
11. Penyimpanan file CSV.
12. Grafik batang momen dipol.

13. Visualisasi vektor dipol.

Jika file hanya berisi satu atau dua baris kode yang tidak berhubungan dengan simetri dan momen dipol, maka nama file tersebut tidak sesuai. Nama file yang ilmiah harus mencerminkan isi.

Kerangka minimal awal file dapat ditulis:

```
# =====
# PRAKTIKUM 5: SIMETRI MOLEKUL, KELOMPOK TITIK,
# DAN MOMEN DIPOL
# Nama file : praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
# Fungsi   : Menghitung pusat massa, vektor dipol sederhana,
#             klasifikasi polar/nonpolar, dan tabel kelompok titik
# =====

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path
```

Komentar awal seperti ini membantu pembaca memahami tujuan file. Kode yang baik tidak hanya berjalan, tetapi juga mudah dibaca, diperiksa, dan digunakan kembali.

7. Komentar Identitas pada Awal File

Selain nama file, komentar identitas pada awal kode juga penting. Komentar ini berfungsi sebagai metadata internal. Jika file berpindah folder atau dikirim kepada dosen, identitas praktikum tetap melekat di dalam file.

Format komentar yang dianjurkan:

```
# =====
# PRAKTIKUM 5
# SIMETRI MOLEKUL, KELOMPOK TITIK, DAN MOMEN DIPOL
# -----
# Nama file : praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
# Topik     : Simetri molekul dan momen dipol
# Molekul   : H2O, NH3, BF3, CH4, CO2, C2H4, benzena
# Output    : CSV, grafik batang, visualisasi vektor dipol
# =====
```

Mahasiswa dapat menambahkan identitas pribadi jika diperlukan:

```
# Nama mahasiswa :
# NIM             :
# Kelas           :
# Tanggal         :
```

Namun, jika kode digunakan sebagai template umum buku, bagian identitas pribadi dapat dibiarkan kosong agar diisi oleh mahasiswa.

Komentar identitas memiliki nilai pedagogis. Mahasiswa belajar bahwa kode ilmiah harus terdokumentasi. Dokumentasi bukan tambahan opsional, melainkan bagian dari praktik komputasi yang baik.

8. Letak File dalam Struktur Folder Praktikum

File `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` sebaiknya ditempatkan dalam folder khusus kode agar tidak bercampur dengan output, gambar, dan laporan. Struktur folder yang dianjurkan adalah:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol/
├── struktur_awal/
│   ├── h2o_awal.xyz
│   ├── nh3_awal.xyz
│   ├── bf3_awal.xyz
│   ├── ch4_awal.xyz
│   ├── co2_awal.xyz
│   ├── c2h4_awal.xyz
│   └── benzena_awal.xyz
├── output_chemcompute/
│   ├── h2o_output.log
│   ├── nh3_output.log
│   ├── bf3_output.log
│   ├── ch4_output.log
│   ├── co2_output.log
│   ├── c2h4_output.log
│   └── benzena_output.log
├── data/
│   └── data_simetri_momen_dipol.csv
├── kode/
│   └── praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
├── output_praktikum_05/
│   ├── tabel_simetri_momen_dipol.csv
│   ├── grafik_momen_dipol.png
│   └── visualisasi_vektor_dipol.png
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_05.docx
```

Struktur ini menunjukkan hubungan antarfolder. Folder `kode/` berisi file Python. Folder `data/` berisi data input. Folder `output_praktikum_05/` berisi hasil analisis Python. Folder `output_chemcompute/` berisi output komputasi. Folder `laporan/` berisi dokumen laporan.

Jika praktikum dilakukan secara sederhana, file Python boleh ditempatkan langsung pada folder utama. Namun, untuk praktik ilmiah yang lebih tertib, subfolder `kode/` lebih dianjurkan.

9. Hubungan Nama File Kode dengan File Input dan Output

Nama file kode harus selaras dengan nama file input dan output. Kode `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` dapat membaca atau menghasilkan file berikut:

Jenis File	Nama yang Dianjurkan
File kode	<code>praktikum_05_simetri_momen_dipol.py</code>
Data input	<code>data_simetri_momen_dipol.csv</code>
Output tabel	<code>tabel_simetri_momen_dipol.csv</code>
Grafik batang	<code>grafik_momen_dipol.png</code>
Visualisasi vektor	<code>visualisasi_vektor_dipol.png</code>
Folder output	<code>output_praktikum_05</code>
Laporan	<code>laporan_praktikum_05.docx</code>

Hubungan alurnya:

```
data_simetri_momen_dipol.csv
→ praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
→ tabel_simetri_momen_dipol.csv
→ grafik_momen_dipol.png
→ visualisasi_vektor_dipol.png
→ laporan_praktikum_05.docx
```

Dengan alur ini, pembaca laporan dapat menelusuri dari mana tabel dan grafik berasal. Jika grafik momen dipol muncul dalam laporan, pembaca dapat melihat file gambar, file CSV, dan kode Python yang menghasilkannya. Inilah inti reproduibilitas.

10. Reproduibilitas dan Keterlacakan Kode

Reproduibilitas berarti hasil praktikum dapat dibuat ulang oleh orang lain dengan data dan kode yang sama. Dalam Praktikum 5, reproduibilitas menuntut agar:

1. File struktur disimpan.
2. Output ChemCompute disimpan.
3. Data koordinat dan muatan parsial disimpan.
4. File Python disimpan dengan nama baku.
5. Output Python disimpan dalam CSV dan gambar.
6. Laporan mencantumkan metode dan sumber data.

Nama `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` membantu reproduibilitas karena file kode mudah ditemukan dan dihubungkan dengan praktikum yang sesuai. Jika nama file acak, proses pelacakan menjadi sulit.

Contoh nama file yang buruk:

```
fix.py
coba.py
simetri2.py
kodebaru.py
praktikum_final.py
```

Nama seperti ini tidak menunjukkan isi, nomor praktikum, atau topik. Jika folder berisi banyak file, dosen akan kesulitan menentukan mana file final.

Nama yang baik:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Nama ini langsung menunjukkan isi dan kedudukannya dalam rangkaian praktikum.

11. Pengelolaan Versi File Kode

Selama praktikum, mahasiswa mungkin membuat beberapa revisi kode. Misalnya, revisi pertama memperbaiki koordinat, revisi kedua memperbaiki muatan parsial, revisi ketiga memperbaiki grafik. Revisi boleh dilakukan, tetapi harus dikelola dengan tertib.

Pola versi yang dianjurkan selama proses kerja:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol_v01.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol_v02.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol_v03.py
```

Namun, file yang dikumpulkan sebagai versi final sebaiknya tetap bernama:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Jika dosen meminta tanda final, dapat digunakan:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol_final.py
```

Namun, nama seperti ini sebaiknya hanya digunakan jika memang diminta. Hindari nama revisi yang tidak profesional seperti:

```
praktikum_fix.py
praktikum_fix_baru.py
praktikum_fix_banget.py
```

```
praktikum_final_beneran.py  
praktikum_final_paling_akhir.py
```

Nama seperti itu tidak mencerminkan disiplin kerja ilmiah. Dalam riset komputasi, revisi harus dikelola dengan pola yang dapat ditelusuri.

12. Cara Menjalankan File Kode

Setelah file disimpan dengan nama yang benar, mahasiswa dapat menjalankannya melalui terminal atau command prompt. Jika file berada dalam folder `kode/`, mahasiswa perlu masuk ke folder tersebut atau memanggil file dengan jalur yang tepat.

Contoh jika file berada di folder utama:

```
python praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Contoh jika file berada dalam folder `kode/`:

```
python kode/praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Pada sistem tertentu:

```
python3 praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Jika kode menggunakan file data dari folder `data/`, mahasiswa harus memastikan jalur file benar. Misalnya:

```
data_path = "data/data_simetri_momen_dipol.csv"
```

Jalur relatif seperti ini lebih baik daripada jalur absolut seperti:

```
C:/Users>NamaMahasiswa/Desktop/Praktikum/data_simetri_momen_dipol.csv
```

Jalur absolut membuat kode sulit dijalankan di komputer lain. Jalur relatif lebih mendukung reproduisibilitas.

13. Kesesuaian Nama File dengan Praktik Pemrograman Ilmiah

Dalam pemrograman ilmiah, nama file harus singkat, jelas, dan deskriptif. Nama `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` memenuhi ketiga syarat tersebut.

Singkat, karena tidak terlalu panjang dan tidak memuat kata yang tidak perlu.

Jelas, karena memuat nomor praktikum dan topik utama.

Deskriptif, karena menunjukkan bahwa file membahas simetri dan momen dipol.

Nama file yang terlalu pendek dapat membingungkan:

```
p5.py
dipol.py
sym.py
```

Nama file yang terlalu panjang juga tidak efisien:

```
praktikum_05_analisis_lengkap_simetri_molekul_kelompok_titik_pusat_massa_vekt
or_dipol_polaritas_grafik_csv.py
```

Nama baku yang digunakan dalam buku ini berada di tengah: cukup lengkap, tetapi tetap praktis.

14. Keterkaitan Nama File dengan Penilaian Praktikum

Dalam proses penilaian, dosen perlu memeriksa banyak file. Nama file yang baku akan memudahkan pemeriksaan. Jika semua mahasiswa mengumpulkan file dengan nama yang sama, dosen dapat langsung menjalankan atau memeriksa file tersebut tanpa menebak-nebak.

Instruksi pengumpulan dapat ditulis:

```
Kumpulkan file kode dengan nama:
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Jika mahasiswa mengumpulkan file dengan nama berbeda, misalnya `kode_saya.py`, dosen harus membuka file terlebih dahulu untuk memastikan isinya. Hal ini mengurangi efisiensi dan dapat menyebabkan kekeliruan.

Dalam sistem pengumpulan otomatis, nama file yang tidak sesuai bahkan dapat membuat file tidak terbaca oleh skrip pemeriksa. Oleh karena itu, mengikuti nama file baku merupakan bagian dari kedisiplinan akademik.

15. Nama File dan Integritas Akademik

Nama file yang jelas juga berhubungan dengan integritas akademik. File kode merupakan bukti bahwa analisis dilakukan secara terstruktur. Jika laporan menampilkan tabel dan grafik, tetapi file kode tidak tersedia atau namanya tidak jelas, hasil laporan sulit diverifikasi.

Dalam Praktikum 5, integritas akademik menuntut keterhubungan berikut:

```
output ChemCompute
→ data koordinat dan muatan parsial
→ praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
→ tabel_simetri_momen_dipol.csv
→ grafik_momen_dipol.png
→ laporan praktikum
```

Jika salah satu bagian hilang, rantai bukti menjadi lemah. Nama file yang baku membantu menjaga rantai tersebut. Dosen dapat memeriksa apakah grafik yang dimasukkan dalam laporan benar-benar berasal dari kode yang dikumpulkan.

Mahasiswa juga harus menghindari menyalin kode tanpa memahami isinya. Jika menggunakan template dari buku, mahasiswa tetap harus mampu menjelaskan fungsi kode, data input, rumus yang digunakan, dan makna output. File kode bukan hanya lampiran teknis, tetapi bagian dari argumen ilmiah.

16. Kesalahan Umum dalam Penamaan File

Beberapa kesalahan umum dalam penamaan file Praktikum 5 adalah sebagai berikut:

Kesalahan	Contoh	Dampak
Menggunakan spasi	praktikum 05 simetri momen dipol.py	Kurang nyaman dijalankan di terminal
Tidak memakai nomor praktikum	simetri_momen_dipol.py	Urutan praktikum tidak jelas
Terlalu umum	analisis.py	Isi file tidak langsung diketahui
Terlalu pendek	p5.py	Tidak informatif
Ekstensi salah	praktikum_05_simetri_momen_dipol.txt	Tidak dikenali sebagai file Python
Ekstensi ganda	praktikum_05_simetri_momen_dipol.py.txt	Berpotensi gagal dijalankan
Nama tidak sesuai isi	optimasi_geometri.py berisi analisis dipol	Menyesatkan
Banyak versi tidak jelas	fix1.py, fix2.py, final.py	Sulit menentukan versi final

Kesalahan-kesalahan ini tampak sederhana, tetapi dalam praktikum komputasi dapat menyebabkan masalah besar. File dapat tertukar, gagal dijalankan, sulit diperiksa, atau tidak sesuai dengan laporan.

17. Standar Minimal File yang Dikumpulkan

Untuk Praktikum 5, file `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` sebaiknya dikumpulkan bersama file pendukung. Standar minimal pengumpulan adalah:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
tabel_simetri_momen_dipol.csv
grafik_momen_dipol.png
visualisasi_vektor_dipol.png
data_simetri_momen_dipol.csv
output ChemCompute atau output software komputasi
laporan_praktikum_05.docx
```

File kode menjadi pusat alur analisis. CSV menunjukkan hasil numerik. Grafik dan visualisasi menunjukkan hasil visual. Output ChemCompute menunjukkan sumber data komputasi. Laporan menunjukkan interpretasi ilmiah.

Jika salah satu file tidak dikumpulkan, laporan menjadi kurang lengkap. Misalnya, jika file Python tidak dikumpulkan, dosen sulit memverifikasi bagaimana grafik dibuat. Jika CSV tidak dikumpulkan, tabel dalam laporan sulit diperiksa. Jika output ChemCompute tidak dikumpulkan, nilai momen dipol tidak dapat ditelusuri ke sumber aslinya.

18. Implikasi Pedagogis Penamaan File

Penamaan file memiliki implikasi pedagogis yang sering diabaikan. Mahasiswa yang terbiasa menamai file secara rapi akan lebih mudah memahami alur kerja ilmiah. Mereka belajar bahwa praktikum bukan hanya soal memperoleh jawaban, tetapi juga mengelola proses.

Melalui nama file `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py`, mahasiswa belajar beberapa hal:

1. Setiap praktikum memiliki identitas.
2. Setiap kode harus sesuai dengan topiknya.
3. Setiap hasil harus dapat ditelusuri ke data dan kode.
4. Setiap file harus mudah dibaca orang lain.
5. Kerapian digital adalah bagian dari kerapian ilmiah.

Dalam kimia komputasi, kemampuan mengelola file sama pentingnya dengan kemampuan menjalankan perhitungan. Banyak kesalahan penelitian terjadi bukan karena teori yang salah,

tetapi karena file tertukar, data tidak terdokumentasi, output hilang, atau kode tidak dapat dijalankan ulang. Karena itu, disiplin penamaan file perlu dilatih sejak praktikum dasar.

19. Transisi ke Output Kode

Subbab 8.7 telah menetapkan nama file kode untuk Praktikum 5, yaitu:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Nama ini dipilih karena jelas, informatif, konsisten dengan urutan praktikum, dan sesuai dengan isi kode. File tersebut digunakan untuk menjalankan analisis Python tentang pusat massa, vektor dipol sederhana, klasifikasi polar/nonpolar, visualisasi vektor dipol, tabel kelompok titik, grafik batang momen dipol, dan penyimpanan hasil CSV.

Subbab berikutnya akan membahas output kode. Setelah file `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` dijalankan, mahasiswa harus memperoleh tabel molekul, kelompok titik, dan momen dipol; visualisasi vektor dipol; klasifikasi polar/nonpolar; file CSV hasil analisis; serta grafik batang momen dipol. Dengan demikian, subbab 8.8 akan menjelaskan bentuk output yang harus dihasilkan, cara membacanya, cara menyimpannya, dan cara menggunakannya dalam laporan praktikum.

8.8 Output Kode

Output kode dalam Praktikum 5 merupakan hasil yang diperoleh setelah file Python `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` dijalankan. Output ini menjadi bukti bahwa mahasiswa telah mengolah data koordinat molekul, muatan parsial, pusat massa, vektor dipol, kelompok titik, dan klasifikasi polaritas secara sistematis. Dengan demikian, output kode bukan sekadar hasil teknis dari program, tetapi bagian dari proses ilmiah yang menghubungkan **simetri molekul** dengan **momen dipol** dan **polaritas molekul**.

Dalam Praktikum 5, output kode wajib memuat lima komponen utama:

1. **Tabel molekul, kelompok titik, dan momen dipol.**
2. **Visualisasi vektor dipol.**
3. **Klasifikasi polar/nonpolar.**
4. **File CSV hasil analisis.**
5. **Grafik batang momen dipol.**

Kelima output tersebut saling melengkapi. Tabel menyajikan data numerik dan klasifikasi. Visualisasi vektor dipol membantu mahasiswa melihat arah resultan dipol. Klasifikasi polar/nonpolar menghubungkan angka dengan konsep kimia. File CSV memastikan hasil dapat disimpan dan diperiksa ulang. Grafik batang momen dipol membantu mahasiswa membandingkan polaritas molekul model secara visual.

Output kode harus dipahami sebagai bagian dari rantai reproduibilitas praktikum:

```
koordinat molekul
→ muatan parsial
→ pusat massa
→ vektor dipol
→ besar momen dipol
→ klasifikasi polar/nonpolar
→ tabel, grafik, visualisasi, CSV
→ laporan praktikum
```

Jika output tidak tersimpan dengan baik, maka analisis dalam laporan menjadi sulit diverifikasi. Oleh karena itu, mahasiswa harus memastikan bahwa setiap file output dihasilkan, disimpan, diberi nama jelas, dan sesuai dengan data input yang digunakan.

1. Kedudukan Output Kode dalam Praktikum 5

Output kode berfungsi sebagai penghubung antara data mentah dan analisis ilmiah. Data mentah berupa koordinat atom dan muatan parsial belum cukup untuk menjelaskan polaritas molekul. Data tersebut harus diolah menjadi pusat massa, komponen vektor dipol, besar momen dipol, klasifikasi polaritas, dan visualisasi arah vektor.

Dalam Praktikum 5, output kode membantu mahasiswa menjawab pertanyaan penting:

1. Molekul mana yang polar?
2. Molekul mana yang nonpolar?
3. Apakah hasil klasifikasi sesuai dengan kelompok titik?
4. Apakah momen dipol molekul simetris mendekati nol?
5. Apakah molekul bengkok atau piramidal memiliki momen dipol tidak nol?
6. Apakah hasil Python konsisten dengan hasil ChemCompute?
7. Apakah data dan grafik dapat digunakan dalam laporan?

Dengan demikian, output kode bukan hanya produk akhir program, tetapi alat untuk membangun argumentasi kimia. Mahasiswa harus membaca output secara kritis, bukan sekadar menyalin angka.

2. Output Pertama: Tabel Molekul, Kelompok Titik, dan Momen Dipol

Output pertama yang wajib dihasilkan adalah tabel yang memuat nama molekul, bentuk molekul, kelompok titik, komponen momen dipol, besar momen dipol total, dan klasifikasi polaritas.

Format tabel yang dianjurkan adalah:

No.	Molekul	Bentuk Molekul	Kelompok Titik	μ_x (D)	μ_y (D)	μ_z (D)	μ Total (D)	Klasifikasi
1	H ₂ O	Bengkok	C _{2v}	...	...	...	...	Polar
2	NH ₃	Piramidal trigonal	C _{3v}	...	...	...	...	Polar
3	BF ₃	Trigonal planar	D _{3h}	...	...	...	...	Nonpolar
4	CH ₄	Tetrahedral	T ^d	...	...	...	...	Nonpolar
5	CO ₂	Linear	D _{∞h}	...	...	...	...	Nonpolar
6	C ₂ H ₄	Planar	D _{2h}	...	...	...	...	Nonpolar
7	Benzena	Planar aromatik	D _{6h}	...	...	...	...	Nonpolar

Tabel ini menjadi pusat output Praktikum 5. Melalui tabel ini, mahasiswa dapat melihat hubungan antara kelompok titik dan momen dipol. Molekul dengan kelompok titik tertentu, seperti C_{2v} dan C_{3v}, dapat memiliki momen dipol tidak nol. Molekul dengan simetri tinggi, seperti D_{3h}, T^d, D_{∞h}, D_{2h}, dan D_{6h}, secara ideal memiliki momen dipol nol.

Namun, tabel tidak boleh dibaca sebagai daftar hafalan. Setiap angka harus dihubungkan dengan struktur molekul. Misalnya, H₂O memiliki momen dipol tidak nol karena bentuknya bengkok. NH₃ memiliki momen dipol tidak nol karena bentuknya piramidal trigonal. CO₂ memiliki momen dipol nol karena dua vektor C=O saling meniadakan dalam struktur linear.

Contoh narasi berdasarkan tabel:

Tabel hasil analisis menunjukkan bahwa H₂O dan NH₃ memiliki momen dipol tidak nol, sedangkan BF₃, CH₄, CO₂, C₂H₄, dan benzena memiliki momen dipol nol atau mendekati nol. Pola ini sesuai dengan teori simetri molekul. H₂O dan NH₃ memiliki bentuk yang tidak menyebabkan semua vektor dipol saling meniadakan, sedangkan molekul-molekul simetris seperti CO₂, BF₃, CH₄, C₂H₄, dan benzena memiliki susunan geometri yang membuat resultan dipol total nol.

Narasi tersebut menunjukkan bahwa tabel digunakan sebagai dasar analisis, bukan hanya sebagai lampiran angka.

3. Komponen μ_x , μ_y , μ_z , dan μ Total

Dalam output kode, momen dipol sebaiknya tidak hanya ditampilkan sebagai nilai total. Komponen vektor μ_x , μ_y , dan μ_z juga perlu ditampilkan agar mahasiswa memahami bahwa momen dipol adalah besaran vektor.

Komponen momen dipol dihitung sebagai:

$$\mu_x = \sum q_i x_i$$

$$\mu_y = \sum q_i y_i$$

$$\mu_z = \sum q_i z_i$$

Besar momen dipol total dihitung sebagai:

$$\mu_{\text{total}} = \sqrt{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)}$$

Jika hasil awal dihitung dalam satuan $\text{e}\text{\AA}$, maka dikonversi ke Debye menggunakan:

$$1 \text{ e}\text{\AA} \approx 4,80320427 \text{ Debye}$$

Dalam laporan, mahasiswa harus menyebut satuan dengan jelas. Jika tabel menampilkan momen dipol dalam Debye, kolom harus diberi label (D). Jangan menulis angka tanpa satuan.

Contoh tabel yang kurang baik:

Molekul	μ
H ₂ O	1.85
CO ₂	0.00

Tabel tersebut kurang lengkap karena tidak menyebut satuan, tidak menunjukkan kelompok titik, dan tidak menunjukkan komponen vektor.

Tabel yang lebih baik:

Molekul	Kelompok Titik	μ_x (D)	μ_y (D)	μ_z (D)	μ Total (D)	Klasifikasi
H ₂ O	C _{2v}	...	...	...	...	Polar
CO ₂	D ∞ h	...	...	...	...	Nonpolar

Tabel kedua lebih ilmiah karena lebih lengkap dan mudah diverifikasi.

4. Output Kedua: Visualisasi Vektor Dipol

Output kedua adalah visualisasi vektor dipol. Visualisasi ini biasanya berupa gambar tiga dimensi yang menampilkan atom, pusat massa, dan panah vektor dipol. Visualisasi sangat penting karena momen dipol bukan hanya angka, tetapi arah resultan pemisahan muatan.

Visualisasi vektor dipol membantu mahasiswa memahami beberapa hal:

1. Dari mana vektor dipol digambar.
2. Ke arah mana resultan dipol molekul.
3. Apakah molekul memiliki vektor dipol yang jelas atau mendekati nol.
4. Bagaimana bentuk molekul memengaruhi arah momen dipol.
5. Mengapa molekul simetris dapat nonpolar.

Untuk molekul H_2O , visualisasi diharapkan menunjukkan vektor dipol total yang tidak nol. Karena H_2O berbentuk bengkok, dua vektor ikatan O–H tidak saling meniadakan. Vektor total muncul sebagai resultan.

Untuk NH_3 , visualisasi dapat menunjukkan vektor dipol sepanjang sumbu simetri C_3 . Bentuk piramidal trigonal menyebabkan resultan dipol tidak nol.

Untuk CO_2 , visualisasi seharusnya menunjukkan vektor total mendekati nol. Jika panah tampak sangat kecil atau tidak signifikan, hasil tersebut sesuai dengan struktur linear simetris.

Untuk BF_3 , tiga vektor dipol B–F tersusun trigonal planar sehingga resultannya nol. Visualisasi total dipol seharusnya mendekati nol.

Untuk CH_4 , C_2H_4 , dan benzena, visualisasi juga seharusnya memperlihatkan resultan dipol yang sangat kecil jika data input simetris.

Nama file visualisasi yang dianjurkan:

```
visualisasi_vektor_dipol_h2o.png
visualisasi_vektor_dipol_nh3.png
visualisasi_vektor_dipol_bf3.png
visualisasi_vektor_dipol_ch4.png
visualisasi_vektor_dipol_co2.png
visualisasi_vektor_dipol_c2h4.png
visualisasi_vektor_dipol_benzena.png
```

Jika hanya satu visualisasi dibuat sebagai contoh, nama file dapat berupa:

```
visualisasi_vektor_dipol.png
```

Namun, untuk laporan yang lebih lengkap, visualisasi setiap molekul lebih dianjurkan.

5. Kriteria Visualisasi Vektor Dipol yang Baik

Visualisasi vektor dipol yang baik harus memenuhi beberapa kriteria.

Pertama, atom harus terlihat jelas. Setiap atom sebaiknya diberi label agar pembaca mengetahui posisi atom pusat dan atom terminal.

Kedua, pusat massa harus ditandai. Jika vektor dipol digambar dari pusat massa, maka titik pusat massa perlu ditunjukkan agar pembaca memahami titik awal vektor.

Ketiga, panah vektor dipol harus memiliki arah yang jelas. Jika skala panah diperbesar, keterangan skala perlu dijelaskan agar pembaca tidak salah memahami besar vektor.

Keempat, sumbu koordinat harus diberi label. Sumbu x, y, dan z penting karena komponen vektor dipol bergantung pada orientasi koordinat.

Kelima, gambar harus diberi judul. Misalnya:

Visualisasi Vektor Dipol H₂O

Keenam, gambar harus disimpan dalam resolusi cukup baik agar dapat dimasukkan ke laporan.

Ketujuh, visualisasi harus sesuai dengan tabel. Jika tabel menunjukkan momen dipol H₂O tidak nol, visualisasi harus menunjukkan vektor yang tidak nol. Jika tabel menunjukkan CO₂ nonpolar, visualisasi tidak boleh menunjukkan panah besar kecuali ada kesalahan input atau skala yang tidak proporsional.

Mahasiswa perlu memahami bahwa visualisasi adalah alat bantu interpretasi. Gambar yang menarik tetapi tidak akurat tidak memiliki nilai ilmiah. Sebaliknya, gambar sederhana tetapi benar secara konsep jauh lebih berguna dalam laporan praktikum.

6. Output Ketiga: Klasifikasi Polar/Nonpolar

Output ketiga adalah klasifikasi molekul menjadi polar atau nonpolar. Klasifikasi ini dilakukan berdasarkan besar momen dipol total dan didukung oleh analisis kelompok titik.

Dalam kode Python, klasifikasi dapat dilakukan dengan ambang sederhana, misalnya:

```
 $\mu_{\text{total}} < 0,05 \text{ D} \rightarrow \text{nonpolar atau mendekati nonpolar}$ 
```

```
 $\mu_{\text{total}} \geq 0,05 \text{ D} \rightarrow \text{polar}$ 
```

Ambang tersebut digunakan untuk keperluan praktikum. Nilai ambang dapat disesuaikan oleh dosen. Prinsip utamanya adalah membedakan nilai yang benar-benar tidak nol dari nilai sangat kecil akibat pembulatan, toleransi numerik, atau ketidaksempurnaan koordinat.

Klasifikasi teoretis molekul model adalah:

Molekul	Kelompok Titik	Klasifikasi Teoretis
H ₂ O	C _{2v}	Polar
NH ₃	C _{3v}	Polar
BF ₃	D _{3h}	Nonpolar
CH ₄	T _d	Nonpolar
CO ₂	D _{∞h}	Nonpolar
C ₂ H ₄	D _{2h}	Nonpolar
Benzena	D _{6h}	Nonpolar

Jika hasil Python berbeda dari klasifikasi teoretis, mahasiswa tidak boleh langsung menyimpulkan bahwa teori salah. Mereka harus memeriksa input koordinat, muatan parsial, dan simetri data.

Contoh analisis jika hasil sesuai:

Hasil Python mengklasifikasikan CO₂ sebagai nonpolar karena momen dipol total mendekati nol. Hasil ini sesuai dengan kelompok titik D_{∞h} dan struktur linear O=C=O yang menyebabkan dua vektor dipol C=O saling meniadakan.

Contoh analisis jika hasil tidak sesuai:

Jika hasil Python menunjukkan BF₃ sebagai polar, maka perlu diperiksa kembali koordinat atom F dan muatan parsial yang digunakan. Secara teori, BF₃ ideal termasuk kelompok titik D_{3h} dan nonpolar karena tiga vektor dipol B-F saling meniadakan.

Klasifikasi polar/nonpolar harus selalu ditulis bersama alasan simetri. Jangan hanya menulis “polar” atau “nonpolar” tanpa penjelasan.

7. Output Keempat: File CSV Hasil Analisis

Output keempat adalah file CSV hasil analisis. CSV adalah format tabel sederhana yang dapat dibuka dengan berbagai program, seperti spreadsheet, editor teks, Python, R, atau software analisis data lain. Dalam praktikum komputasi, CSV penting karena mendukung reproduibilitas dan keterlacakan data.

Nama file CSV yang dianjurkan adalah:

tabel_simetri_momen_dipol.csv

Isi minimal file CSV:

```
kode,molekul,bentuk,kelompok_titik,polaritas_teoris,pusat_massa_x,pusat_massa_y,pusat_massa_z,mu_x_D,mu_y_D,mu_z_D,mu_total_D,polaritas_python
```

CSV tersebut harus memuat:

1. Nama molekul.
2. Bentuk molekul.
3. Kelompok titik.
4. Polaritas teoretis.
5. Koordinat pusat massa.
6. Komponen momen dipol.
7. Besar momen dipol total.
8. Klasifikasi polaritas dari Python.

CSV berfungsi sebagai arsip data hasil analisis. Jika laporan memuat tabel dan grafik, CSV menjadi sumber yang dapat diperiksa ulang. Dosen dapat membuka CSV untuk memastikan apakah data pada laporan sesuai dengan hasil kode.

CSV juga memudahkan mahasiswa memperbaiki laporan. Jika ada kesalahan pada satu molekul, mahasiswa dapat memperbarui data, menjalankan ulang kode, dan menghasilkan CSV baru. Hal ini lebih baik daripada menghitung manual dan menyalin angka satu per satu.

8. Kriteria File CSV yang Baik

File CSV yang baik harus memenuhi kriteria berikut:

Kriteria	Penjelasan
Nama jelas	Nama file menunjukkan isi analisis
Kolom lengkap	Memuat molekul, kelompok titik, momen dipol, dan klasifikasi
Satuan jelas	Kolom momen dipol diberi label D
Data konsisten	Data sesuai dengan output grafik dan laporan
Tidak ada kolom kosong penting	Semua molekul memiliki data utama
Dapat dibuka ulang	File tidak rusak dan dapat dibuka dengan spreadsheet
Reprodusibel	Dihasilkan dari kode Python yang dikumpulkan
Tidak bercampur dengan data mentah	Data hasil analisis dibedakan dari data input
Mudah diperiksa	Nama kolom jelas dan tidak ambigu
Disimpan pada folder output	Tidak tercecer di folder lain

Contoh nama kolom yang baik:

```
molekul
bentuk
kelompok_titik
mu_total_D
polaritas_python
```

Contoh nama kolom yang kurang baik:

```
a
b
hasil
nilai
ket
```

Nama kolom harus deskriptif agar pembaca dapat memahami isi file tanpa bertanya kepada pembuatnya.

9. Output Kelima: Grafik Batang Momen Dipol

Output kelima adalah grafik batang momen dipol. Grafik ini menampilkan perbandingan besar momen dipol total untuk semua molekul model. Grafik batang sangat berguna untuk melihat pola polaritas secara visual.

Format grafik yang dianjurkan:

- Sumbu x: nama molekul.
- Sumbu y: momen dipol total dalam Debye.
- Judul: Grafik Batang Momen Dipol Molekul Model.
- Setiap batang mewakili satu molekul.
- Grafik disimpan dalam format PNG.
- Nama file: grafik_momen_dipol.png.

Grafik batang membantu mahasiswa melihat bahwa H_2O dan NH_3 memiliki nilai momen dipol tidak nol, sedangkan BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena memiliki nilai mendekati nol dalam struktur ideal.

Contoh interpretasi grafik:

Grafik batang momen dipol menunjukkan bahwa H_2O dan NH_3 memiliki momen dipol lebih besar daripada molekul model lain. Hal ini sesuai dengan bentuk bengkok H_2O dan bentuk piramidal trigonal NH_3 . Sebaliknya, BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena memiliki momen dipol mendekati nol karena simetri molekulnya menyebabkan vektor dipol saling meniadakan.

Grafik harus ditafsirkan bersama kelompok titik. Jika grafik menunjukkan CO_2 mendekati nol, mahasiswa harus menjelaskan bahwa CO_2 linear dan termasuk $D_{\infty h}$. Jika BF_3 mendekati nol, mahasiswa harus menjelaskan bahwa BF_3 trigonal planar dan termasuk D_{3h} .

10. Kriteria Grafik Batang yang Baik

Grafik batang yang baik harus memenuhi beberapa kriteria.

Pertama, grafik harus memiliki judul yang jelas. Judul tidak boleh terlalu umum seperti “Grafik Hasil”. Judul yang baik adalah:

Grafik Batang Momen Dipol Molekul Model

Kedua, sumbu y harus menyebut satuan:

Momen Dipol Total (Debye)

Ketiga, sumbu x harus menampilkan nama molekul dengan jelas. Jika nama molekul panjang, label dapat dimiringkan agar tidak saling bertumpuk.

Keempat, grafik tidak boleh memanipulasi skala secara menyesatkan. Jika molekul nonpolar memiliki nilai sangat kecil, grafik harus tetap memperlihatkan bahwa nilainya mendekati nol.

Kelima, grafik harus konsisten dengan CSV dan tabel. Data yang digunakan untuk grafik harus berasal dari tabel hasil analisis, bukan dari data berbeda.

Keenam, grafik harus disimpan dengan resolusi cukup baik, misalnya 300 dpi, agar nyaman dibaca dalam laporan.

Ketujuh, grafik harus dianalisis dalam teks. Grafik yang dimasukkan tanpa penjelasan tidak cukup. Mahasiswa harus menulis makna pola grafik.

11. Folder Output yang Dianjurkan

Semua output kode sebaiknya disimpan dalam folder khusus:

```
output_praktikum_05/
```

Isi folder yang dianjurkan:

```
output_praktikum_05/
├── tabel_simetri_momen_dipol.csv
├── grafik_momen_dipol.png
├── visualisasi_vektor_dipol_h2o.png
├── visualisasi_vektor_dipol_nh3.png
├── visualisasi_vektor_dipol_bf3.png
├── visualisasi_vektor_dipol_ch4.png
├── visualisasi_vektor_dipol_co2.png
├── visualisasi_vektor_dipol_c2h4.png
└── visualisasi_vektor_dipol_benzena.png
```

Jika hanya satu visualisasi dibuat sebagai contoh, folder dapat berisi:

```
output_praktikum_05/
├── tabel_simetri_momen_dipol.csv
├── grafik_momen_dipol.png
└── visualisasi_vektor_dipol.png
```

Namun, untuk laporan yang lebih lengkap, visualisasi setiap molekul lebih baik. Folder output yang rapi memudahkan mahasiswa dan dosen menelusuri hasil.

12. Hubungan Output Kode dengan Laporan Praktikum

Output kode harus digunakan dalam laporan praktikum. Laporan tidak cukup hanya menyatakan bahwa kode telah dijalankan. Laporan harus memuat tabel hasil, grafik, visualisasi yang relevan, dan analisis.

Struktur penyajian dalam laporan dapat berupa:

1. Tabel molekul, kelompok titik, dan momen dipol.
2. Grafik batang momen dipol.
3. Visualisasi vektor dipol beberapa molekul utama.
4. Klasifikasi polar/nonpolar.
5. Analisis hubungan simetri dan momen dipol.
6. Perbandingan hasil Python dan ChemCompute.
7. Catatan keterbatasan model muatan parsial.

Contoh paragraf laporan:

Kode `praktikum_05_simetri_momen_dipol.py` menghasilkan tabel momen dipol untuk H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena. Hasil menunjukkan bahwa H_2O dan NH_3 memiliki momen dipol tidak nol, sedangkan molekul dengan simetri lebih tinggi seperti CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena memiliki momen dipol nol atau mendekati nol. Pola ini sesuai dengan teori simetri molekul, yaitu bahwa vektor dipol pada molekul simetris dapat saling meniadakan.

Paragraf tersebut menghubungkan output kode dengan teori. Ini lebih baik daripada hanya menulis:

Kode menghasilkan tabel dan grafik.

Karena tujuan praktikum bukan hanya menghasilkan file, tetapi menafsirkan maknanya.

13. Validasi Output Kode

Setelah kode dijalankan, mahasiswa harus memvalidasi output sebelum digunakan dalam laporan. Validasi ini penting karena output yang tampak rapi belum tentu benar secara kimia.

Daftar validasi:

Aspek	Pertanyaan Validasi
File kode	Apakah <code>praktikum_05_simetri_momen_dipol.py</code> berjalan tanpa error?
CSV	Apakah <code>tabel_simetri_momen_dipol.csv</code> tersimpan?
Grafik	Apakah <code>grafik_momen_dipol.png</code> tersimpan dan terbaca?
Visualisasi	Apakah file visualisasi vektor dipol tersimpan?
Molekul	Apakah semua molekul model masuk tabel?

Kelompok titik	Apakah kelompok titik sesuai analisis manual?
Momen dipol	Apakah nilai polar/nonpolar masuk akal?
Satuan	Apakah momen dipol dalam Debye?
Data input	Apakah koordinat dan muatan parsial benar?
Konsistensi	Apakah tabel, grafik, dan CSV memakai data yang sama?

Jika ada output yang tidak sesuai, mahasiswa harus memeriksa kode dan data input sebelum menulis laporan.

Contoh masalah:

Grafik menunjukkan BF₃ memiliki momen dipol besar.

Kemungkinan penyebab:

1. Koordinat F tidak simetris.
2. Muatan parsial tidak setara pada tiga atom F.
3. Struktur tidak trigonal planar.
4. Data salah ketik.
5. Molekul tertukar dengan data lain.

Validasi semacam ini melatih mahasiswa berpikir kritis terhadap hasil komputasi.

14. Menafsirkan Nilai Momen Dipol Kecil

Dalam output Python, molekul nonpolar ideal dapat memiliki momen dipol kecil tetapi tidak persis nol. Hal ini dapat terjadi karena pembulatan koordinat, pembulatan muatan parsial, atau ketidaksempurnaan simetri data input.

Misalnya:

```
μ total BF3 = 0,003 D
μ total CO2 = 0,001 D
μ total CH4 = 0,004 D
```

Nilai seperti itu dapat dianggap mendekati nol jika struktur dan muatan parsial simetris. Namun, mahasiswa harus tetap menuliskan bahwa nilainya “mendekati nol”, bukan “persis nol”, jika angka output tidak benar-benar 0.

Contoh kalimat yang baik:

Nilai momen dipol CO₂ dari hasil Python sangat kecil dan dapat dianggap mendekati nol. Hasil ini konsisten dengan struktur linear dan kelompok titik D_{∞h}, yang menyebabkan dua vektor dipol C=O saling meniadakan.

Kalimat yang kurang tepat:

CO₂ polar karena nilai momen dipolnya tidak benar-benar nol.

Pernyataan kedua keliru jika nilai tersebut hanya deviasi numerik sangat kecil. Mahasiswa harus memahami perbedaan antara nilai bermakna secara kimia dan noise numerik atau ketidaksempurnaan data.

15. Membandingkan Output Python dengan Output ChemCompute

Output Python sebaiknya dibandingkan dengan output ChemCompute. Perbandingan ini membantu mahasiswa memahami perbedaan antara model muatan titik dan perhitungan struktur elektronik.

Format tabel perbandingan:

Molekul	Kelompok Titik	μ Python (D)	μ ChemCompute (D)	Kesesuaian Pola	Catatan
H ₂ O	C _{2v}	...	...	Sesuai/Tidak	Polar
NH ₃	C _{3v}	...	...	Sesuai/Tidak	Polar
BF ₃	D _{3h}	...	...	Sesuai/Tidak	Nonpolar
CH ₄	T ^d	...	...	Sesuai/Tidak	Nonpolar
CO ₂	D _{∞h}	...	...	Sesuai/Tidak	Nonpolar
C ₂ H ₄	D _{2h}	...	...	Sesuai/Tidak	Nonpolar
Benzena	D _{6h}	...	...	Sesuai/Tidak	Nonpolar

Perbandingan ini tidak harus menghasilkan angka yang sama persis. Yang lebih penting adalah pola polaritas. Jika Python dan ChemCompute sama-sama menunjukkan H₂O polar dan CO₂ nonpolar, maka pemahaman konsep sudah konsisten. Jika berbeda, mahasiswa harus memeriksa model muatan parsial dan koordinat.

Contoh analisis:

Nilai momen dipol Python tidak harus sama persis dengan nilai ChemCompute karena Python menggunakan model muatan parsial titik, sedangkan ChemCompute menghitung momen dipol dari distribusi elektron. Namun, pola klasifikasi polar dan nonpolar tetap dapat dibandingkan. Jika pola keduanya konsisten, maka hasil mendukung hubungan antara simetri dan momen dipol.

Pernyataan ini menunjukkan kesadaran terhadap batas model.

16. Kesalahan Umum dalam Output Kode

Beberapa kesalahan umum dalam output kode Praktikum 5 adalah:

Kesalahan	Dampak
CSV tidak tersimpan	Data hasil sulit diverifikasi
Grafik tidak memiliki satuan	Pembaca tidak mengetahui skala momen dipol
Visualisasi panah terlalu besar	Pembaca dapat salah menafsirkan nilai kecil
Kelompok titik salah	Analisis simetri keliru
Molekul nonpolar tampak polar karena data tidak simetris	Klasifikasi salah
Muatan parsial tidak netral	Momen dipol bergantung pada titik asal
Tabel dan grafik memakai data berbeda	Laporan tidak konsisten
Tidak menyebutkan bahwa data Python adalah model sederhana	Kesalahan metodologis
Tidak membandingkan dengan teori	Analisis menjadi mekanis
Tidak menyimpan gambar	Laporan kehilangan bukti visual

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari dengan pemeriksaan akhir. Output kode harus dibaca seperti data ilmiah, bukan sekadar produk otomatis komputer.

17. Pemeriksaan Akhir Output Kode

Sebelum memasukkan output ke laporan, mahasiswa dapat menggunakan daftar periksa berikut:

```
[ ] File praktikum_05_simetri_momen_dipol.py berjalan tanpa error.
[ ] Semua molekul model masuk dalam tabel hasil.
[ ] Kelompok titik telah dimasukkan dengan benar.
[ ] Momen dipol ditampilkan dalam Debye.
[ ] Komponen  $\mu_x$ ,  $\mu_y$ , dan  $\mu_z$  tersedia.
[ ]  $\mu$  total dihitung dengan benar.
[ ] Klasifikasi polar/nonpolar sesuai dengan teori simetri.
[ ] File tabel_simetri_momen_dipol.csv tersimpan.
[ ] File grafik_momen_dipol.png tersimpan.
[ ] File visualisasi vektor dipol tersimpan.
[ ] Grafik memiliki judul, label sumbu, dan satuan.
[ ] Nilai kecil pada molekul nonpolar ditafsirkan sebagai mendekati nol.
[ ] Hasil Python dibandingkan dengan hasil ChemCompute jika tersedia.
[ ] Output siap dimasukkan ke laporan.
```

Daftar periksa ini membantu mahasiswa menghindari kesalahan teknis dan konseptual. Dalam praktikum komputasi, pemeriksaan akhir sangat penting karena kesalahan kecil pada input dapat menghasilkan output yang tampak rapi tetapi salah.

18. Implikasi Ilmiah Output Kode

Output kode dalam Praktikum 5 memiliki implikasi ilmiah yang penting. Pertama, output menunjukkan bahwa polaritas molekul dapat dianalisis secara kuantitatif melalui momen dipol. Kedua, output memperlihatkan bahwa momen dipol adalah besaran vektor yang bergantung pada distribusi muatan dan geometri molekul. Ketiga, output membantu memperkuat konsep simetri: molekul dengan simetri tertentu dapat memiliki momen dipol nol karena vektor dipol saling meniadakan.

Keempat, output membantu mahasiswa memahami bahwa bentuk molekul memiliki konsekuensi terhadap sifat fisik. H_2O dan NH_3 polar karena bentuknya tidak membuat vektor dipol saling meniadakan. CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena nonpolar karena simetrinya tinggi.

Kelima, output kode memperlihatkan pentingnya model. Python menggunakan model muatan titik, sedangkan ChemCompute menggunakan perhitungan struktur elektronik. Kedua pendekatan dapat saling melengkapi jika ditafsirkan secara benar.

19. Implikasi Pedagogis Output Kode

Secara pedagogis, output kode membantu mahasiswa mengembangkan beberapa keterampilan.

Pertama, mahasiswa belajar membaca tabel ilmiah. Mereka harus memahami kolom kelompok titik, komponen momen dipol, momen dipol total, dan klasifikasi polaritas.

Kedua, mahasiswa belajar membaca grafik. Mereka melihat pola bahwa molekul polar memiliki batang momen dipol lebih tinggi, sedangkan molekul nonpolar mendekati nol.

Ketiga, mahasiswa belajar membaca visualisasi vektor. Mereka memahami bahwa arah dipol memiliki makna dan dipengaruhi oleh geometri molekul.

Keempat, mahasiswa belajar reproduibilitas. Dengan CSV, grafik, dan kode, hasil dapat diperiksa ulang.

Kelima, mahasiswa belajar berpikir kritis. Jika output tidak sesuai teori, mereka harus mencari penyebabnya, bukan langsung menerima angka.

Dengan demikian, output kode adalah bagian penting dari proses belajar. Ia melatih mahasiswa menghubungkan data, teori, visualisasi, dan argumentasi kimia.

20. Transisi ke Analisis

Subbab 8.8 telah membahas output kode yang wajib dihasilkan dalam Praktikum 5, yaitu tabel molekul, kelompok titik, dan momen dipol; visualisasi vektor dipol; klasifikasi polar/nonpolar; file CSV hasil analisis; serta grafik batang momen dipol. Output tersebut menjadi dasar untuk membaca hubungan antara simetri molekul dan polaritas secara lebih sistematis.

Subbab berikutnya akan membahas analisis. Pada subbab 8.9, mahasiswa akan diarahkan menjelaskan mengapa molekul simetris tertentu memiliki momen dipol nol, sedangkan molekul bengkok atau piramidal memiliki momen dipol tidak nol. Dengan demikian, subbab 8.9 akan mengubah output kode menjadi argumentasi kimia yang lebih mendalam.

8.9 Analisis

Analisis dalam Praktikum 5 diarahkan untuk menjelaskan **mengapa molekul simetris tertentu memiliki momen dipol nol, sedangkan molekul bengkok atau piramidal memiliki momen dipol tidak nol**. Setelah mahasiswa memperoleh output dari ChemCompute dan Python, tahap berikutnya bukan sekadar membaca nilai momen dipol, melainkan menghubungkannya dengan bentuk molekul, kelompok titik, unsur simetri, dan resultan vektor dipol.

Inti analisis Praktikum 5 adalah bahwa **polaritas molekul bukan hanya ditentukan oleh polaritas ikatan, tetapi oleh resultan seluruh vektor dipol dalam ruang tiga dimensi**. Suatu molekul dapat memiliki beberapa ikatan polar, tetapi tetap nonpolar jika susunan geometrinya menyebabkan vektor-vektor dipol saling meniadakan. Sebaliknya, molekul dengan ikatan polar dan bentuk tidak simetris dapat memiliki momen dipol total tidak nol.

Dalam teori simetri molekul, momen dipol merupakan besaran vektor. Vektor ini memiliki arah dan besar. Karena itu, analisis momen dipol tidak cukup dilakukan dengan melihat apakah suatu ikatan polar atau tidak. Mahasiswa harus menjawab pertanyaan yang lebih mendasar: **apakah susunan ruang molekul memungkinkan semua vektor dipol saling meniadakan?** Jika ya, molekul nonpolar. Jika tidak, molekul polar.

Molekul model dalam Praktikum 5 memberikan pola perbandingan yang jelas. H_2O dan NH_3 memiliki momen dipol tidak nol karena bentuknya bengkok dan piramidal. BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan **benzena** secara ideal memiliki momen dipol nol karena simetrinya tinggi. Dengan membandingkan semua molekul ini, mahasiswa dapat memahami bahwa simetri adalah alat konseptual yang kuat untuk membaca polaritas.

1. Makna Analisis Simetri dan Momen Dipol

Analisis simetri dan momen dipol adalah proses menafsirkan hubungan antara geometri molekul dan distribusi muatan. Momen dipol muncul jika pusat muatan positif dan pusat muatan negatif tidak berimpit. Secara vektorial, momen dipol dapat dipahami melalui persamaan sederhana:

$$\mu = \sum q_i r_i$$

Dalam bentuk komponen Cartesian:

$$\mu_x = \sum q_i x_i$$

$$\mu_y = \sum q_i y_i$$

$$\mu_z = \sum q_i z_i$$

Besar momen dipol total adalah:

$$|\mu| = \sqrt{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)}$$

Rumus tersebut memperlihatkan bahwa momen dipol bergantung pada muatan dan posisi. Akan tetapi, dalam molekul nyata, distribusi elektron bersifat kuantum dan kontinu. Karena itu, nilai momen dipol dari ChemCompute, ORCA, atau Gaussian berasal dari perhitungan distribusi elektron, bukan hanya dari muatan titik. Meskipun demikian, pendekatan vektor sederhana tetap sangat berguna untuk memahami konsep polaritas.

Dalam analisis Praktikum 5, mahasiswa harus menghubungkan tiga hal:

bentuk molekul
→ kelompok titik
→ resultan vektor dipol

Jika ketiganya sesuai, analisis menjadi kuat. Misalnya, CO₂ berbentuk linear, termasuk kelompok titik D_{∞h}, dan memiliki momen dipol nol. Ketiga informasi tersebut saling mendukung. Sebaliknya, jika hasil perhitungan menunjukkan CO₂ memiliki momen dipol besar, mahasiswa harus memeriksa apakah geometri input salah, apakah molekul tidak linear, atau apakah data muatan parsial dalam Python tidak simetris.

2. Dasar Teoretis: Momen Dipol sebagai Vektor

Momen dipol adalah besaran vektor. Artinya, momen dipol tidak hanya memiliki besar, tetapi juga arah. Dalam kimia dasar, sering dikatakan bahwa “molekul polar memiliki momen dipol”. Pernyataan itu benar, tetapi belum lengkap. Penjelasan yang lebih tepat adalah: molekul polar memiliki **resultan vektor dipol permanen yang tidak nol**.

Setiap ikatan polar dapat dipandang memiliki vektor dipol ikatan. Jika vektor-vektor tersebut dijumlahkan, hasilnya dapat nol atau tidak nol. Inilah alasan mengapa molekul dengan ikatan polar belum tentu polar.

Secara konseptual:

ikatan polar + geometri simetris

- vektor dipol saling meniadakan
- momen dipol total nol
- molekul nonpolar

Sebaliknya:

- ikatan polar + geometri tidak saling meniadakan
- resultan vektor dipol tidak nol
- molekul polar

Dengan cara berpikir vektorial ini, mahasiswa dapat memahami mengapa H_2O polar tetapi CO_2 nonpolar, meskipun keduanya memiliki ikatan polar. H_2O bengkok sehingga vektor O–H tidak saling meniadakan. CO_2 linear sehingga dua vektor C=O saling berlawanan dan meniadakan.

Teori grup memperkuat penjelasan tersebut. Dalam kelompok titik tertentu, simetri molekul dapat melarang adanya momen dipol permanen. Jika suatu molekul memiliki pusat inversi atau simetri tinggi yang meniadakan semua komponen vektor, maka momen dipol total harus nol. Sebaliknya, kelompok titik seperti C_{2v} dan C_{3v} memungkinkan adanya komponen momen dipol sepanjang sumbu tertentu.

3. Latar Historis Konsep Simetri dalam Kimia

Secara historis, konsep simetri masuk ke kimia melalui perkembangan teori grup dalam matematika dan fisika. Pada awalnya, teori grup adalah bahasa abstrak untuk memahami operasi dan struktur matematis. Dalam kimia, teori grup kemudian menjadi alat untuk mengklasifikasikan molekul, orbital, mode vibrasi, dan transisi spektrum.

Literatur klasik seperti karya Cotton, Bishop, Carter, Harris dan Bertolucci, Atkins dan Friedman, serta Levine menunjukkan bahwa simetri sangat penting dalam memahami molekul. Simetri membantu kimiawan menentukan kelompok titik, memprediksi polaritas, membaca aktivitas IR dan Raman, mengklasifikasikan orbital, serta memahami aturan seleksi. Dalam konteks Praktikum 5, bagian yang digunakan masih sederhana: mahasiswa tidak perlu menyusun tabel karakter secara lengkap, tetapi harus memahami bahwa simetri menentukan apakah vektor dipol dapat bertahan atau harus saling meniadakan.

Dengan latar historis tersebut, analisis momen dipol tidak berdiri sendiri. Ia merupakan bagian dari tradisi lebih luas dalam kimia fisik dan kimia kuantum: menggunakan simetri untuk menyederhanakan persoalan molekul. Molekul yang secara visual tampak sederhana dapat mengandung informasi simetri yang kaya. Sebaliknya, molekul yang tampak memiliki ikatan polar dapat menjadi nonpolar karena simetrinya.

4. Prinsip Umum: Molekul Simetris dan Momen Dipol Nol

Molekul simetris tertentu memiliki momen dipol nol karena setiap vektor dipol memiliki pasangan atau susunan ekuivalen yang meniadakannya. Dalam molekul dengan simetri tinggi, operasi simetri memaksa distribusi muatan tersusun sedemikian rupa sehingga tidak ada arah tunggal yang menjadi arah polar permanen.

Beberapa ciri molekul yang sering menghasilkan momen dipol nol adalah:

1. Memiliki pusat inversi.
2. Memiliki susunan linear simetris.
3. Memiliki geometri trigonal planar simetris.
4. Memiliki geometri tetrahedral simetris.
5. Memiliki cincin planar dengan distribusi atom simetris.
6. Memiliki kelompok titik tinggi seperti $D_{\infty h}$, D_{3h} , T_d , D_{2h} , atau D_{6h} .

Contoh molekul dalam Praktikum 5:

Molekul	Kelompok Titik	Alasan Momen Dipol Nol
CO ₂	$D_{\infty h}$	Dua vektor C=O sama besar dan berlawanan arah
BF ₃	D_{3h}	Tiga vektor B–F tersusun simetris 120°
CH ₄	T_d	Empat vektor C–H tersusun tetrahedral simetris
C ₂ H ₄	D_{2h}	Memiliki pusat inversi dan simetri planar
Benzena	D_{6h}	Simetri cincin aromatik sangat tinggi dan memiliki pusat inversi

Molekul-molekul tersebut menunjukkan bahwa momen dipol nol bukan berarti tidak ada ikatan polar sama sekali. Momen dipol nol berarti **resultan vektor dipol total nol**.

5. Prinsip Umum: Molekul Bengkok atau Piramidal dan Momen Dipol Tidak Nol

Molekul bengkok atau piramidal memiliki momen dipol tidak nol karena geometri molekul tidak memungkinkan vektor dipol saling meniadakan secara sempurna. H₂O dan NH₃ menjadi contoh utama.

H₂O berbentuk bengkok. Dua ikatan O–H bersifat polar, dan karena sudut H–O–H tidak 180°, kedua vektor dipol O–H tidak saling berlawanan secara linear. Resultannya tidak nol.

NH₃ berbentuk piramidal trigonal. Tiga ikatan N–H tersusun dalam bentuk piramida, bukan trigonal planar. Karena adanya pasangan elektron bebas pada nitrogen, distribusi muatan tidak simetris seperti BF₃. Resultan vektor dipol tidak nol dan berada sepanjang sumbu C₃.

Ringkasan:

Molekul	Bentuk	Kelompok Titik	Alasan Momen Dipol Tidak Nol
H ₂ O	Bengkok	C _{2v}	Vektor O–H tidak saling meniadakan
NH ₃	Piramidal trigonal	C _{3v}	Resultan dipol berada sepanjang sumbu C ₃

Kelompok titik C_{2v} dan C_{3v} masih memiliki simetri, tetapi simetri tersebut tidak cukup tinggi untuk meniadakan seluruh komponen vektor dipol. Dalam kelompok C_{2v}, momen dipol dapat berada sepanjang sumbu utama. Dalam kelompok C_{3v}, momen dipol dapat berada sepanjang sumbu C₃. Karena itu, H₂O dan NH₃ polar.

6. Analisis H₂O: Molekul Bengkok dan Polar

H₂O adalah contoh paling penting untuk memahami hubungan antara bentuk bengkok dan momen dipol. Molekul ini memiliki dua ikatan O–H yang polar. Oksigen lebih elektronegatif daripada hidrogen sehingga distribusi elektron dalam ikatan O–H lebih tertarik ke arah oksigen.

Namun, polaritas H₂O tidak hanya disebabkan oleh elektronegativitas oksigen. Faktor penentu lainnya adalah bentuk molekul. H₂O tidak linear, melainkan bengkok. Jika H₂O linear, dua vektor dipol O–H dapat saling meniadakan. Tetapi karena bentuknya bengkok, resultan vektor tetap ada.

Secara konseptual:

H₂O
 → ikatan O–H polar
 → bentuk bengkok
 → vektor O–H tidak berlawanan secara linear
 → resultan dipol tidak nol
 → polar

Kelompok titik H₂O adalah C_{2v}. Kelompok ini memiliki sumbu C₂ dan bidang simetri, tetapi tetap memungkinkan momen dipol sepanjang arah tertentu. Dengan demikian, H₂O adalah contoh bahwa molekul dapat memiliki unsur simetri tetapi tetap polar.

Dalam laporan praktikum, analisis H₂O sebaiknya tidak hanya menyatakan “H₂O polar”. Analisis yang baik adalah:

H₂O memiliki bentuk bengkok dan kelompok titik C_{2v}. Dua ikatan O–H bersifat polar, tetapi karena sudut H–O–H tidak linear, vektor dipol kedua ikatan tidak saling meniadakan. Resultan momen dipol mengarah ke sisi atom O, sehingga H₂O bersifat polar.

Analisis ini menghubungkan elektronegativitas, bentuk, vektor, kelompok titik, dan polaritas.

7. Analisis NH₃: Molekul Piramidal Trigonal dan Polar

NH₃ adalah contoh molekul piramidal trigonal. Atom N berada di puncak piramida, sedangkan tiga atom H membentuk dasar segitiga. Bentuk ini muncul karena nitrogen memiliki pasangan elektron bebas yang memengaruhi geometri molekul.

NH₃ termasuk kelompok titik C_{3v}. Molekul ini memiliki sumbu C₃ dan tiga bidang simetri vertikal. Meskipun memiliki simetri, NH₃ tetap polar karena vektor dipol N–H tidak saling meniadakan. Resultan dipol berada sepanjang sumbu C₃.

Secara konseptual:

NH₃
 → ikatan N–H polar
 → bentuk piramidal trigonal
 → resultan dipol tidak nol
 → polar

NH₃ sangat baik dibandingkan dengan BF₃. Keduanya memiliki tiga atom terminal, tetapi berbeda bentuk. NH₃ piramidal dan polar, sedangkan BF₃ trigonal planar dan nonpolar. Perbedaan ini menunjukkan bahwa jumlah atom terminal bukan penentu polaritas. Geometri dan simetri lebih menentukan.

Contoh analisis laporan:

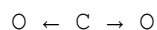
NH₃ memiliki bentuk piramidal trigonal dengan kelompok titik C_{3v}. Tiga ikatan N–H tidak tersusun dalam satu bidang trigonal planar seperti BF₃, sehingga vektor dipolnya tidak saling meniadakan. Resultan dipol berada sepanjang sumbu C₃. Oleh karena itu, NH₃ memiliki momen dipol tidak nol dan bersifat polar.

Analisis ini harus dikaitkan dengan output kode. Jika grafik batang menunjukkan NH₃ memiliki momen dipol tidak nol, mahasiswa harus menjelaskan bahwa hasil tersebut sesuai dengan bentuk piramidal trigonal.

8. Analisis CO₂: Ikatan Polar tetapi Molekul Nonpolar

CO₂ adalah contoh utama molekul dengan ikatan polar tetapi momen dipol total nol. Molekul CO₂ memiliki struktur linear O=C=O. Setiap ikatan C=O bersifat polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada karbon. Namun, dua ikatan C=O tersusun dalam arah berlawanan.

Secara vektorial:



Dua vektor dipol memiliki besar yang sama dan arah berlawanan. Ketika dijumlahkan, resultannya nol.

$$\mu \text{ kiri} + \mu \text{ kanan} = 0$$

Kelompok titik CO₂ adalah D_{∞h}. Molekul ini memiliki pusat inversi dan simetri linear tinggi. Keberadaan pusat inversi memastikan bahwa molekul tidak memiliki momen dipol permanen.

Analisis yang baik:

CO₂ memiliki dua ikatan C=O yang polar, tetapi struktur molekulnya linear dan simetris. Dua vektor dipol C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan, sehingga resultan momen dipolnya nol. Karena itu, CO₂ bersifat nonpolar meskipun ikatannya polar.

Perbandingan H₂O dan CO₂ harus menjadi bagian penting analisis:

Aspek	H ₂ O	CO ₂
Jumlah atom	3	3
Ikatan polar	Ya	Ya
Bentuk	Bengkok	Linear
Resultan dipol	Tidak nol	Nol
Polaritas	Polar	Nonpolar

Perbandingan ini menunjukkan bahwa bentuk molekul menentukan apakah vektor dipol saling meniadakan.

9. Analisis BF₃: Trigonal Planar dan Nonpolar

BF₃ memiliki tiga ikatan B–F yang polar. Fluor sangat elektronegatif, sehingga setiap ikatan B–F memiliki polaritas. Namun, BF₃ berbentuk trigonal planar dengan tiga atom F tersusun simetris mengelilingi atom B. Sudut F–B–F sekitar 120°.

Tiga vektor dipol B–F memiliki besar yang sama dan tersusun merata dalam satu bidang. Jika dijumlahkan secara vektor, resultannya nol.

Secara konseptual:



- tiga ikatan B–F polar
- trigonal planar
- vektor dipol terpisah 120°
- resultan nol
- nonpolar

Kelompok titik BF_3 adalah D_{3h} . Simetri D_{3h} meniadakan momen dipol permanen. Karena itu, BF_3 nonpolar meskipun ikatan B–F polar.

Analisis yang baik:

BF_3 memiliki tiga ikatan B–F yang polar, tetapi molekul ini berbentuk trigonal planar dan termasuk kelompok titik D_{3h} . Tiga vektor dipol B–F tersusun simetris dengan sudut 120° , sehingga resultannya nol. Oleh karena itu, BF_3 bersifat nonpolar.

BF_3 juga penting untuk menunjukkan perbedaan antara polaritas dan reaktivitas. BF_3 nonpolar, tetapi dapat bertindak sebagai asam Lewis karena atom B kekurangan elektron. Dengan demikian, nonpolaritas tidak berarti molekul tidak reaktif. Ini adalah contoh penting agar mahasiswa tidak menyederhanakan sifat molekul secara berlebihan.

10. Analisis CH_4 : Simetri Tetrahedral dan Momen Dipol Nol

CH_4 memiliki bentuk tetrahedral dengan atom C di pusat dan empat atom H di sudut tetrahedron. Kelompok titiknya adalah T_d , salah satu kelompok titik dengan simetri tinggi. Dalam struktur ideal, keempat ikatan C–H ekuivalen dan tersusun simetris.

Jika masing-masing ikatan C–H dianggap memiliki vektor dipol kecil, empat vektor tersebut tersusun sedemikian rupa sehingga resultannya nol. Karena itu, CH_4 nonpolar.

Secara konseptual:

CH_4
 → tetrahedral simetris
 → empat vektor C–H saling meniadakan
 → momen dipol nol
 → nonpolar

Analisis yang baik:

CH_4 memiliki bentuk tetrahedral dengan kelompok titik T_d . Empat ikatan C–H tersusun secara simetris mengelilingi atom C. Karena simetri tetrahedral meniadakan seluruh komponen vektor dipol, CH_4 memiliki momen dipol total nol dan bersifat nonpolar.

CH_4 juga dapat digunakan untuk menjelaskan efek penurunan simetri. Jika satu atom H diganti oleh Cl, misalnya menjadi CH_3Cl , simetri tetrahedral ideal turun dan momen dipol muncul. Ini menunjukkan bahwa perubahan substituen dapat mengubah polaritas dengan menurunkan simetri molekul.

11. Analisis C_2H_4 : Molekul Planar dengan Pusat Inversi

C_2H_4 atau etilena memiliki struktur planar. Dalam bentuk ideal, molekul ini termasuk kelompok titik D_{2h} . Salah satu unsur simetri penting pada C_2H_4 adalah pusat inversi. Keberadaan pusat inversi menyebabkan molekul tidak dapat memiliki momen dipol permanen.

Jika sebuah molekul memiliki pusat inversi, setiap distribusi muatan pada satu sisi memiliki pasangan ekuivalen pada sisi berlawanan. Akibatnya, setiap komponen dipol akan ditiadakan oleh komponen lain.

Secara konseptual:

C_2H_4
 → planar
 → memiliki pusat inversi
 → vektor dipol saling meniadakan
 → momen dipol nol
 → nonpolar

Analisis yang baik:

C_2H_4 memiliki struktur planar dengan kelompok titik D_{2h} . Keberadaan pusat inversi menyebabkan setiap kontribusi vektor dipol memiliki pasangan yang meniadakannya. Oleh karena itu, etilena tidak memiliki momen dipol permanen dan bersifat nonpolar.

C_2H_4 menarik karena telah digunakan pada Bab 7 untuk analisis HOMO-LUMO. Dalam Bab 8, molekul yang sama dianalisis dari sudut pandang simetri dan momen dipol. Ini menunjukkan bahwa satu molekul dapat menjadi objek pembelajaran untuk berbagai konsep kimia kuantum.

12. Analisis Benzena: Simetri Aromatik Tinggi dan Nonpolaritas

Benzena adalah molekul aromatik planar dengan kelompok titik D_{6h} . Molekul ini memiliki simetri tinggi, termasuk sumbu C_6 , bidang horizontal, bidang vertikal, beberapa sumbu C_2 , dan pusat inversi. Karena susunan atom dan distribusi elektron π sangat simetris, benzena tidak memiliki momen dipol permanen.

Secara konseptual:

Benzena
 → planar aromatik
 → kelompok titik D_{6h}
 → pusat inversi dan simetri tinggi
 → seluruh kontribusi dipol saling meniadakan
 → nonpolar

Analisis yang baik:

Benzena memiliki struktur planar aromatik dengan kelompok titik D_{6h} . Simetri cincin yang tinggi menyebabkan distribusi muatan dan vektor dipol tersusun secara seimbang. Karena semua kontribusi vektor dipol saling meniadakan, benzena memiliki momen dipol total nol dan bersifat nonpolar.

Benzena juga menunjukkan hubungan antara simetri dan spektroskopi. Karena memiliki pusat inversi, mode vibrasi benzena mengikuti pola seleksi tertentu dalam IR dan Raman. Walaupun Praktikum 5 tidak membahas tabel karakter secara rinci, mahasiswa perlu memahami bahwa simetri tinggi benzena memiliki konsekuensi lebih luas daripada sekadar nonpolaritas.

13. Membaca Hasil Grafik Batang Momen Dipol

Grafik batang momen dipol dari output Python atau data ChemCompute harus dibaca dengan prinsip simetri. Grafik tidak boleh hanya dilihat sebagai tinggi rendah batang. Mahasiswa harus menjelaskan penyebab pola tersebut.

Pola yang diharapkan:

H_2O dan NH_3

→ batang momen dipol tidak nol

BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , benzena

→ batang momen dipol nol atau mendekati nol

Interpretasi yang baik:

Grafik batang menunjukkan bahwa H_2O dan NH_3 memiliki momen dipol lebih besar daripada molekul model lain. Hal ini sesuai dengan bentuk bengkok H_2O dan piramidal trigonal NH_3 . Sebaliknya, BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena memiliki momen dipol mendekati nol karena simetri molekulnya menyebabkan resultan vektor dipol saling meniadakan.

Interpretasi yang kurang baik:

Grafik menunjukkan H_2O dan NH_3 tinggi, sedangkan yang lain rendah.

Pernyataan kedua hanya mendeskripsikan grafik, tetapi belum menganalisis. Analisis harus menghubungkan grafik dengan teori simetri.

14. Membaca Visualisasi Vektor Dipol

Visualisasi vektor dipol membantu mahasiswa melihat arah resultan dipol. Untuk H_2O , panah dipol harus menunjukkan resultan yang tidak nol akibat bentuk bengkok. Untuk NH_3 , panah dipol

mengarah sepanjang sumbu simetri molekul. Untuk CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena, panah dipol seharusnya sangat kecil atau tidak signifikan jika struktur dan muatan simetris.

Namun, visualisasi harus ditafsirkan hati-hati. Skala panah dalam gambar dapat diperbesar agar terlihat. Jika skala diperbesar, vektor kecil pada molekul nonpolar dapat tampak besar secara visual. Oleh karena itu, visualisasi harus selalu dibaca bersama nilai numerik momen dipol.

Prinsip analisis:

visualisasi vektor
→ menunjukkan arah dipol

nilai numerik
→ menunjukkan besar dipol

kelompok titik
→ menjelaskan mengapa dipol ada atau tidak ada

Ketiganya harus digunakan bersama. Jika hanya menggunakan visualisasi, mahasiswa dapat salah menafsirkan skala. Jika hanya menggunakan angka, mahasiswa kehilangan pemahaman arah vektor. Jika hanya menggunakan kelompok titik, mahasiswa belum memanfaatkan output komputasi.

15. Perbandingan Hasil Python dan ChemCompute

Hasil Python dan ChemCompute dapat berbeda secara angka, tetapi seharusnya konsisten secara pola jika input dan modelnya benar. ChemCompute menghitung momen dipol dari distribusi elektron berdasarkan metode struktur elektronik. Python menghitung momen dipol sederhana dari koordinat dan muatan parsial.

Perbandingan metodologis:

Aspek	ChemCompute	Python
Dasar perhitungan	Struktur elektronik	Muatan titik
Input utama	Struktur, metode, basis set	Koordinat, muatan parsial
Output	Momen dipol kuantum	Momen dipol sederhana
Kekuatan	Lebih dekat ke model kuantum	Memperjelas konsep vektor
Keterbatasan	Bergantung metode dan basis set	Bergantung muatan parsial

Jika ChemCompute dan Python sama-sama menunjukkan H_2O polar dan CO_2 nonpolar, maka pola konseptualnya kuat. Jika berbeda, mahasiswa harus menganalisis penyebabnya.

Kemungkinan penyebab perbedaan:

1. Muatan parsial tidak simetris.

2. Koordinat tidak teroptimasi.
3. Struktur tidak sesuai bentuk ideal.
4. Ambang klasifikasi terlalu kecil.
5. Kesalahan satuan.
6. Kesalahan memasukkan data.
7. Perbedaan antara model muatan titik dan distribusi elektron kuantum.

Analisis kritis semacam ini penting. Mahasiswa harus memahami bahwa perbedaan hasil bukan sekadar “error”, tetapi dapat menjadi bahan refleksi tentang model dan keterbatasannya.

16. Analisis Kritis: Simetri Ideal vs Struktur Nyata

Dalam teori, molekul seperti BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena memiliki momen dipol nol. Namun, dalam perhitungan numerik, hasil dapat menunjukkan nilai sangat kecil tetapi tidak persis nol. Hal ini dapat terjadi karena struktur tidak sepenuhnya ideal, pembulatan koordinat, toleransi optimasi, atau penggunaan muatan parsial yang tidak benar-benar simetris.

Mahasiswa harus membedakan:

momen dipol kecil karena deviasi numerik
 $\neq$
 momen dipol bermakna secara kimia

Contoh:

BF_3 ideal seharusnya nonpolar.
 Jika hasil menunjukkan $\mu = 0,002 \text{ D}$,
 nilai ini dapat dianggap mendekati nol jika struktur trigonal planar benar.

Namun:

Jika BF_3 menunjukkan $\mu = 1,5 \text{ D}$,
 hasil tersebut tidak boleh langsung diterima.
 Mahasiswa harus memeriksa struktur, koordinat, muatan, dan status optimasi.

Analisis kritis ini penting karena praktikum komputasi selalu berhadapan dengan model dan toleransi numerik. Angka kecil harus ditafsirkan dalam konteks.

17. Analisis Kritis: Polaritas Bukan Satu-Satunya Ukuran Reaktivitas

Mahasiswa juga harus memahami bahwa polaritas tidak sama dengan reaktivitas. Molekul polar dapat reaktif, tetapi polaritas bukan satu-satunya faktor. Molekul nonpolar juga dapat reaktif dalam kondisi tertentu.

Contoh BF_3 sangat penting. BF_3 nonpolar karena simetri trigonal planar meniadakan momen dipol. Namun, BF_3 tetap dapat bertindak sebagai asam Lewis karena atom B memiliki orbital kosong dan dapat menerima pasangan elektron. Dengan demikian, nonpolaritas tidak berarti tidak reaktif.

Contoh lain, benzena nonpolar tetapi dapat mengalami reaksi substitusi aromatik elektrofilik dalam kondisi tertentu. CO_2 nonpolar secara momen dipol permanen, tetapi dapat bereaksi dengan nukleofil kuat atau basa dalam kondisi tertentu. Oleh karena itu, momen dipol adalah salah satu sifat molekul, bukan penentu tunggal seluruh perilaku kimia.

Pernyataan ilmiah yang baik:

BF_3 nonpolar karena simetri trigonal planar meniadakan momen dipol total. Namun, BF_3 tetap dapat berperan sebagai asam Lewis karena faktor reaktivitasnya berkaitan dengan kekurangan elektron pada boron, bukan semata-mata dengan momen dipol permanen.

Pernyataan yang kurang tepat:

BF_3 nonpolar sehingga tidak reaktif.

Pernyataan kedua salah karena menyamakan polaritas dengan seluruh aspek reaktivitas.

18. Hubungan Simetri dengan Spektrum Molekul

Simetri juga memengaruhi spektrum molekul. Dalam spektroskopi IR, mode vibrasi aktif jika menyebabkan perubahan momen dipol. Molekul nonpolar permanen tetap dapat memiliki mode vibrasi aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol sesaat.

CO_2 adalah contoh penting. CO_2 tidak memiliki momen dipol permanen karena strukturnya linear dan simetris. Namun, beberapa mode vibrasinya dapat aktif IR karena vibrasi tertentu mengubah momen dipol sesaat. Regangan simetris CO_2 tidak menghasilkan perubahan momen dipol, sedangkan regangan antisimetri dan pembengkokan dapat menghasilkan perubahan momen dipol.

Prinsip umum:

momen dipol permanen

→ sifat polaritas molekul pada keadaan setimbang

perubahan momen dipol selama vibrasi

→ berkaitan dengan aktivitas IR

Dengan demikian, “molekul nonpolar” tidak berarti “tidak aktif IR sama sekali”. Aktivitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi, bukan hanya momen dipol permanen.

Simetri juga memengaruhi Raman. Mode Raman aktif jika menyebabkan perubahan polarisabilitas. Dalam molekul dengan pusat inversi, terdapat aturan eksklusi tertentu: mode yang

aktif IR tidak aktif Raman dan sebaliknya. Pembahasan rinci memerlukan tabel karakter, tetapi Praktikum 5 memberi dasar awal untuk memahami hubungan simetri dan spektrum.

19. Hubungan Simetri dengan Aktivitas Optik

Aktivitas optik berkaitan dengan kiralitas. Molekul kiral tidak dapat ditumpangtindihkan dengan bayangan cerminnya dan tidak memiliki unsur simetri seperti bidang cermin, pusat inversi, atau sumbu rotasi tidak proper tertentu. Dalam Praktikum 5, molekul model seperti H_2O , NH_3 , BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena bukan contoh utama molekul kiral, tetapi pembahasan simetri memberi dasar untuk memahami kiralitas.

Penting untuk membedakan:

Konsep	Makna
Polar	Memiliki momen dipol permanen tidak nol
Nonpolar	Momen dipol permanen nol
Kiral	Tidak dapat ditumpangtindihkan dengan bayangan cermin
Optik aktif	Dapat memutar bidang polarisasi cahaya

Molekul polar belum tentu kiral. H_2O polar, tetapi tidak kiral karena memiliki bidang simetri. NH_3 polar, tetapi bukan molekul kiral sederhana. Sebaliknya, molekul kiral tidak selalu memiliki momen dipol besar. Dengan demikian, polaritas dan aktivitas optik adalah konsep berbeda, meskipun sama-sama dipengaruhi oleh simetri.

20. Struktur Analisis yang Dianjurkan dalam Laporan

Agar laporan praktikum tersusun baik, mahasiswa dapat menggunakan struktur analisis berikut:

1. Menyebutkan molekul model yang dianalisis.
2. Menyajikan tabel kelompok titik dan momen dipol.
3. Menjelaskan hasil untuk molekul polar.
4. Menjelaskan hasil untuk molekul nonpolar.
5. Membandingkan H_2O dan CO_2 .
6. Membandingkan NH_3 dan BF_3 .
7. Menjelaskan CH_4 , C_2H_4 , dan benzena sebagai molekul simetris.
8. Membaca grafik batang momen dipol.
9. Membaca visualisasi vektor dipol.
10. Membandingkan hasil Python dan ChemCompute.
11. Menyebutkan keterbatasan analisis.
12. Menulis kesimpulan sementara.

Contoh paragraf pembuka analisis:

Analisis momen dipol dilakukan dengan menghubungkan nilai momen dipol total dengan kelompok titik dan bentuk molekul. H_2O dan NH_3 menunjukkan momen dipol tidak nol karena bentuknya bengkok dan piramidal trigonal. Sebaliknya, BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena menunjukkan momen dipol nol atau mendekati nol karena simetri molekulnya menyebabkan resultan vektor dipol saling meniadakan.

Contoh paragraf penutup analisis:

Secara keseluruhan, hasil praktikum menunjukkan bahwa simetri molekul berperan menentukan polaritas. Molekul yang memiliki susunan vektor dipol simetris cenderung nonpolar, sedangkan molekul dengan bentuk bengkok atau piramidal memiliki resultan dipol tidak nol. Hasil ini memperkuat pemahaman bahwa polaritas molekul harus dianalisis secara vektorial dan tidak cukup ditentukan dari polaritas ikatan saja.

21. Kesalahan Umum dalam Analisis

Beberapa kesalahan umum dalam analisis Praktikum 5 adalah:

Kesalahan	Dampak
Menganggap semua ikatan polar menghasilkan molekul polar	Salah memahami resultan vektor
Menganggap CO_2 nonpolar karena ikatan $\text{C}=\text{O}$ tidak polar	Salah; ikatan $\text{C}=\text{O}$ polar, resultannya nol
Menganggap BF_3 nonpolar karena $\text{B}-\text{F}$ tidak polar	Salah; $\text{B}-\text{F}$ polar, resultannya nol
Tidak menyebut kelompok titik	Analisis simetri tidak lengkap
Mengabaikan arah vektor dipol	Analisis hanya numerik
Menafsirkan nilai sangat kecil sebagai polar	Salah membaca toleransi numerik
Menyamakan polaritas dengan reaktivitas	Kesimpulan kimia terlalu luas
Menyamakan polaritas dengan kiralitas	Konsep optik menjadi keliru
Tidak membandingkan H_2O dengan CO_2	Kehilangan inti pembelajaran
Tidak membandingkan NH_3 dengan BF_3	Kehilangan peran geometri tiga dimensi

Mahasiswa harus menghindari kesalahan tersebut dengan selalu mengaitkan nilai momen dipol dengan bentuk molekul dan kelompok titik.

22. Implikasi Keilmuan Analisis Simetri dan Momen Dipol

Analisis simetri dan momen dipol memiliki implikasi keilmuan yang luas.

Pertama, mahasiswa belajar bahwa sifat molekul tidak hanya berasal dari jenis atom, tetapi juga dari susunan ruang atom. H_2O dan CO_2 sama-sama memiliki ikatan polar, tetapi polaritasnya berbeda karena bentuknya berbeda.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa simetri dapat meniadakan sifat vektorial. Dalam molekul seperti BF_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_4 , dan benzena, vektor dipol saling meniadakan karena simetri.

Ketiga, mahasiswa belajar bahwa kelompok titik bukan hafalan abstrak, melainkan alat prediksi sifat molekul. Dari kelompok titik, mahasiswa dapat memperkirakan kemungkinan momen dipol permanen.

Keempat, mahasiswa belajar bahwa hasil komputasi harus ditafsirkan secara kritis. Nilai momen dipol kecil perlu dibaca dalam konteks toleransi numerik dan simetri ideal.

Kelima, mahasiswa belajar bahwa simetri berhubungan dengan bidang lain seperti spektroskopi IR, Raman, aktivitas optik, kimia anorganik, dan kimia material.

23. Implikasi Pedagogis Praktikum 5

Secara pedagogis, Praktikum 5 membantu mahasiswa mengembangkan tiga keterampilan utama.

Pertama, **keterampilan spasial**. Mahasiswa belajar melihat molekul sebagai objek tiga dimensi, bukan hanya gambar dua dimensi.

Kedua, **keterampilan vektorial**. Mahasiswa belajar menjumlahkan vektor dipol dan memahami mengapa resultannya dapat nol atau tidak nol.

Ketiga, **keterampilan interpretatif**. Mahasiswa belajar menulis penjelasan ilmiah berdasarkan data, grafik, visualisasi, dan teori simetri.

Praktikum ini juga membantu mahasiswa mengatasi miskonsepsi umum. Banyak mahasiswa mengira bahwa molekul dengan ikatan polar pasti polar. Melalui H_2O , CO_2 , BF_3 , dan NH_3 , mereka melihat bahwa polaritas molekul lebih kompleks dan harus dianalisis berdasarkan geometri serta simetri.

24. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Subbab 8.9 telah menjelaskan bagaimana menganalisis hubungan antara simetri molekul dan momen dipol. Molekul simetris seperti CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena memiliki momen dipol nol atau mendekati nol karena vektor dipol saling meniadakan. Sebaliknya, molekul bengkok seperti H_2O dan molekul piramidal seperti NH_3 memiliki momen dipol tidak nol karena resultan vektor dipol tidak hilang.

Subbab berikutnya akan membahas pertanyaan diskusi. Pertanyaan tersebut akan menguji kemampuan mahasiswa menjelaskan mengapa CO_2 nonpolar sedangkan H_2O polar, mengapa BF_3 nonpolar, apa hubungan simetri dengan polaritas, dan bagaimana simetri memengaruhi spektrum

molekul. Dengan demikian, subbab 8.10 akan menjadi ruang refleksi konseptual untuk memastikan bahwa mahasiswa tidak hanya memperoleh output praktikum, tetapi juga mampu menjelaskan makna kimianya secara benar.

8.10 Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 5 berfungsi untuk menguji apakah mahasiswa benar-benar memahami hubungan antara **simetri molekul**, **kelompok titik**, **momen dipol**, **polaritas**, dan **spektrum molekul**. Pada tahap ini, mahasiswa tidak cukup hanya menyajikan tabel hasil Python atau output ChemCompute. Mahasiswa harus mampu menjelaskan makna kimia dari data tersebut dengan bahasa ilmiah yang runtut, argumentatif, dan berbasis teori.

Pertanyaan diskusi Praktikum 5 adalah:

1. **Mengapa CO₂ nonpolar sedangkan H₂O polar?**
2. **Mengapa BF₃ nonpolar?**
3. **Apa hubungan simetri dengan polaritas?**
4. **Bagaimana simetri memengaruhi spektrum molekul?**

Keempat pertanyaan tersebut mencerminkan inti Bab 8. Pertanyaan pertama menguji pemahaman mahasiswa tentang perbedaan bentuk linear dan bengkok. Pertanyaan kedua menguji pemahaman tentang molekul trigonal planar dengan ikatan polar tetapi resultan dipol nol. Pertanyaan ketiga menguji pemahaman umum tentang hubungan simetri dan polaritas. Pertanyaan keempat memperluas pembahasan menuju spektroskopi, terutama hubungan simetri dengan aktivitas IR dan Raman.

Pertanyaan diskusi harus dijawab dengan menghubungkan **data praktikum**, **teori simetri**, **konsep vektor dipol**, dan **contoh molekul model**. Jawaban yang hanya berupa hafalan, misalnya “CO₂ nonpolar karena bentuknya linear” atau “H₂O polar karena bengkok”, masih belum cukup. Jawaban yang baik harus menjelaskan mengapa bentuk linear menyebabkan vektor dipol saling meniadakan, sedangkan bentuk bengkok menyebabkan resultan vektor dipol tidak nol.

1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum 5

Pertanyaan diskusi memiliki fungsi penting dalam praktikum kimia kuantum. Fungsi utamanya adalah mengubah hasil komputasi menjadi pemahaman ilmiah. Mahasiswa telah menghitung atau membaca momen dipol, membuat tabel kelompok titik, membuat grafik batang, dan memvisualisasikan vektor dipol. Namun, semua output tersebut belum bermakna jika tidak dianalisis secara konseptual.

Dalam Praktikum 5, pertanyaan diskusi membantu mahasiswa melakukan beberapa hal:

1. Menghubungkan bentuk molekul dengan polaritas.
2. Menghubungkan kelompok titik dengan momen dipol.

3. Membedakan polaritas ikatan dan polaritas molekul.
4. Membaca hasil momen dipol sebagai besaran vektor.
5. Menjelaskan peran simetri dalam meniadakan atau mempertahankan resultan dipol.
6. Mengaitkan simetri dengan spektrum molekul.
7. Menghindari miskonsepsi bahwa semua ikatan polar menghasilkan molekul polar.
8. Menghindari miskonsepsi bahwa molekul nonpolar tidak memiliki konsekuensi spektroskopi.
9. Melatih penulisan argumentasi ilmiah berbasis data.

Secara pedagogis, pertanyaan diskusi menjadi ruang untuk menguji kedalaman berpikir mahasiswa. Mahasiswa yang hanya menghafal akan menjawab secara pendek. Mahasiswa yang memahami teori akan mampu menjelaskan hubungan antara struktur, vektor, simetri, dan data praktikum.

2. Petunjuk Umum Menjawab Pertanyaan Diskusi

Sebelum menjawab setiap pertanyaan, mahasiswa perlu memperhatikan petunjuk umum berikut.

Pertama, jawaban harus dimulai dari konsep dasar. Jika pertanyaan membahas polaritas, mahasiswa harus menjelaskan bahwa momen dipol adalah besaran vektor. Jika pertanyaan membahas simetri, mahasiswa harus menjelaskan bahwa simetri dapat menyebabkan vektor-vektor dipol saling meniadakan.

Kedua, jawaban harus menggunakan data praktikum. Mahasiswa perlu merujuk pada tabel momen dipol, kelompok titik, grafik batang, atau visualisasi vektor dipol yang dihasilkan dari kode Python dan ChemCompute.

Ketiga, jawaban harus membedakan polaritas ikatan dan polaritas molekul. Ikatan polar tidak selalu menghasilkan molekul polar. Molekul polar hanya terbentuk jika resultan seluruh vektor dipol tidak nol.

Keempat, jawaban harus menyebut bentuk molekul dan kelompok titik. Misalnya, H_2O berbentuk bengkok dan termasuk C_{2v} , sedangkan CO_2 linear dan termasuk $D_{\infty h}$. BF_3 berbentuk trigonal planar dan termasuk D_{3h} .

Kelima, jawaban harus menghindari klaim berlebihan. Misalnya, jangan menulis “molekul nonpolar tidak aktif IR sama sekali” tanpa analisis mode vibrasi. Yang lebih tepat adalah “aktivitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi, bukan hanya pada momen dipol permanen.”

Keenam, jawaban harus menunjukkan kesadaran terhadap batas model. Hasil Python berbasis muatan parsial titik tidak selalu sama persis dengan output ChemCompute, ORCA, atau Gaussian, tetapi dapat digunakan untuk memahami pola vektor dipol.

Pola jawaban yang dianjurkan:

- definisi konsep
- penjelasan teori
- data atau contoh praktikum
- analisis simetri
- kesimpulan
- batas interpretasi bila diperlukan

3. Pertanyaan Diskusi 1: Mengapa CO₂ Nonpolar sedangkan H₂O Polar?

Pertanyaan pertama berbunyi:

Mengapa CO₂ nonpolar sedangkan H₂O polar?

Pertanyaan ini sangat penting karena CO₂ dan H₂O sering menimbulkan miskonsepsi. Keduanya merupakan molekul triatomik. Keduanya memiliki ikatan polar. Namun, polaritas molekulnya berbeda. CO₂ nonpolar, sedangkan H₂O polar. Perbedaan ini muncul karena bentuk molekul dan simetrinya berbeda.

CO₂ memiliki struktur linear:



Dua ikatan C=O bersifat polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada karbon. Akan tetapi, kedua vektor dipol C=O tersusun dalam satu garis lurus dengan arah berlawanan. Karena besar kedua vektor sama dan arahnya berlawanan, resultannya nol. Oleh karena itu, CO₂ tidak memiliki momen dipol permanen dan diklasifikasikan sebagai molekul nonpolar.

Secara konseptual:

- CO₂
- dua ikatan C=O polar
 - bentuk linear
 - vektor dipol sama besar dan berlawanan arah
 - resultan momen dipol nol
 - nonpolar

H₂O berbeda. H₂O memiliki dua ikatan O–H yang polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada hidrogen. Akan tetapi, bentuk H₂O tidak linear, melainkan bengkok. Karena bentuk bengkok, dua vektor dipol O–H tidak saling berlawanan secara sempurna. Akibatnya, resultan vektor dipol tidak nol. Oleh karena itu, H₂O bersifat polar.

Secara konseptual:

- H₂O
- dua ikatan O–H polar
 - bentuk bengkok

- vektor dipol tidak saling meniadakan
- resultan momen dipol tidak nol
- polar

Perbedaan antara CO_2 dan H_2O dapat diringkas dalam tabel berikut:

Aspek	CO_2	H_2O
Jumlah atom	3	3
Ikatan polar	C=O polar	O–H polar
Bentuk molekul	Linear	Bengkok
Kelompok titik	$D_{\infty h}$	C_{2v}
Resultan dipol	Nol	Tidak nol
Polaritas	Nonpolar	Polar

Tabel ini menunjukkan bahwa keberadaan ikatan polar bukan satu-satunya penentu polaritas molekul. Faktor yang sangat menentukan adalah **geometri molekul** dan **simetri vektor dipol**.

4. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 1

Jawaban mahasiswa untuk pertanyaan pertama harus memuat beberapa unsur berikut:

1. CO_2 memiliki dua ikatan C=O yang polar.
2. CO_2 berbentuk linear.
3. Dua vektor dipol C=O sama besar dan berlawanan arah.
4. Resultan vektor dipol CO_2 nol.
5. CO_2 nonpolar.
6. H_2O memiliki dua ikatan O–H yang polar.
7. H_2O berbentuk bengkok.
8. Vektor dipol O–H tidak saling meniadakan.
9. Resultan momen dipol H_2O tidak nol.
10. H_2O polar.
11. Perbedaan keduanya disebabkan oleh geometri dan simetri, bukan sekadar oleh jumlah atom.

Contoh jawaban yang baik:

CO_2 nonpolar karena molekul ini berbentuk linear dan simetris. Meskipun setiap ikatan C=O bersifat polar, dua vektor dipol C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan sehingga resultannya nol. Sebaliknya, H_2O bersifat polar karena molekulnya berbentuk bengkok. Dua ikatan O–H juga polar, tetapi vektornya tidak tersusun berlawanan secara linear sehingga resultannya tidak nol. Jadi, perbedaan polaritas CO_2 dan H_2O disebabkan oleh perbedaan geometri dan simetri molekul.

Jawaban tersebut baik karena tidak hanya menyebut bentuk, tetapi menjelaskan akibat bentuk terhadap resultan vektor dipol.

Jawaban yang kurang tepat:

CO₂ nonpolar karena tidak punya ikatan polar, sedangkan H₂O polar karena punya ikatan polar.

Jawaban ini salah karena CO₂ memiliki ikatan C=O yang polar. Yang membuat CO₂ nonpolar adalah resultan vektor dipolnya nol akibat struktur linear simetris.

5. Pertanyaan Diskusi 2: Mengapa BF₃ Nonpolar?

Pertanyaan kedua berbunyi:

Mengapa BF₃ nonpolar?

BF₃ atau boron trifluorida adalah contoh penting karena memiliki ikatan polar tetapi molekulnya nonpolar. Ikatan B–F bersifat polar karena fluor lebih elektronegatif daripada boron. Jika hanya melihat polaritas ikatan, mahasiswa mungkin mengira BF₃ harus polar. Namun, analisis molekul harus mempertimbangkan susunan vektor dipol dalam ruang.

BF₃ berbentuk trigonal planar. Atom B berada di pusat, sedangkan tiga atom F tersusun dalam satu bidang dengan sudut sekitar 120°. Tiga vektor dipol B–F memiliki besar yang sama dan arah yang tersusun simetris. Ketika ketiga vektor ini dijumlahkan, resultannya nol.

Secara konseptual:

BF₃
 → tiga ikatan B–F polar
 → bentuk trigonal planar
 → tiga vektor dipol terpisah 120°
 → resultan vektor dipol nol
 → nonpolar

Kelompok titik BF₃ adalah D_{3h}. Kelompok titik ini menunjukkan bahwa molekul memiliki simetri tinggi. Simetri trigonal planar BF₃ meniadakan momen dipol permanen. Dengan demikian, BF₃ nonpolar bukan karena ikatan B–F tidak polar, melainkan karena susunan ketiga ikatan B–F sangat simetris.

6. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 2

Jawaban mahasiswa untuk pertanyaan kedua harus memuat unsur berikut:

1. BF_3 memiliki tiga ikatan B–F.
2. Ikatan B–F bersifat polar.
3. BF_3 berbentuk trigonal planar.
4. Tiga vektor dipol B–F tersusun simetris dengan sudut sekitar 120° .
5. Resultan ketiga vektor dipol nol.
6. BF_3 termasuk kelompok titik D_{3h} .
7. Karena resultan momen dipol nol, BF_3 nonpolar.
8. Nonpolaritas BF_3 tidak berarti ikatannya tidak polar.
9. Nonpolaritas BF_3 tidak berarti BF_3 tidak reaktif.

Contoh jawaban yang baik:

BF_3 nonpolar karena bentuk molekulnya trigonal planar dan sangat simetris. Setiap ikatan B–F bersifat polar karena fluor lebih elektronegatif daripada boron. Namun, tiga vektor dipol B–F tersusun dalam satu bidang dengan sudut sekitar 120° sehingga saling meniadakan. Oleh karena itu, resultan momen dipol BF_3 adalah nol. BF_3 termasuk kelompok titik D_{3h} , yang konsisten dengan sifat nonpolarinya.

Jawaban tersebut baik karena menjelaskan bahwa ikatan B–F polar tetapi resultan molekul nol.

Jawaban yang kurang tepat:

BF_3 nonpolar karena ikatan B–F tidak polar.

Jawaban ini salah karena ikatan B–F polar. Kesalahan ini menunjukkan bahwa mahasiswa belum membedakan polaritas ikatan dan polaritas molekul.

Jawaban lain yang kurang tepat:

BF_3 nonpolar sehingga tidak reaktif.

Pernyataan ini juga keliru. BF_3 memang nonpolar secara momen dipol permanen, tetapi tetap dapat bertindak sebagai asam Lewis karena atom B dapat menerima pasangan elektron. Dengan demikian, polaritas dan reaktivitas tidak boleh disamakan secara sederhana.

7. Pertanyaan Diskusi 3: Apa Hubungan Simetri dengan Polaritas?

Pertanyaan ketiga berbunyi:

Apa hubungan simetri dengan polaritas?

Pertanyaan ini merupakan inti konseptual Praktikum 5. Simetri berhubungan langsung dengan polaritas karena momen dipol adalah besaran vektor. Jika molekul memiliki simetri yang menyebabkan semua komponen vektor dipol saling meniadakan, maka molekul tersebut nonpolar.

Sebaliknya, jika simetri molekul tidak cukup untuk meniadakan resultan vektor dipol, molekul dapat bersifat polar.

Secara umum:

simetri tinggi
 → vektor dipol saling meniadakan
 → momen dipol total nol
 → molekul nonpolar

Sebaliknya:

simetri lebih rendah
 → vektor dipol tidak seluruhnya saling meniadakan
 → momen dipol total tidak nol
 → molekul polar

Namun, pernyataan ini harus digunakan hati-hati. Tidak semua molekul dengan simetri rendah pasti memiliki momen dipol besar. Besar momen dipol juga bergantung pada polaritas ikatan dan distribusi muatan. Simetri menentukan apakah momen dipol **diizinkan** atau **ditiadakan** oleh bentuk molekul. Nilai akhirnya tetap ditentukan oleh distribusi elektron dan geometri.

Kelompok titik dapat digunakan untuk memperkirakan polaritas molekul. Kelompok titik seperti C_{2v} dan C_{3v} dapat memungkinkan momen dipol sepanjang arah tertentu. Karena itu, H_2O dan NH_3 dapat polar. Kelompok titik dengan simetri lebih tinggi seperti $D_{\infty h}$, D_{3h} , T_d , D_{2h} , dan D_{6h} sering meniadakan momen dipol permanen. Karena itu, CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena nonpolar dalam struktur ideal.

Tabel ringkas:

Molekul	Kelompok Titik	Simetri	Polaritas
H_2O	C_{2v}	Simetri terbatas, vektor tidak hilang	Polar
NH_3	C_{3v}	Momen dipol diizinkan sepanjang sumbu C_3	Polar
BF_3	D_{3h}	Vektor B–F saling meniadakan	Nonpolar
CH_4	T_d	Tetrahedral simetris	Nonpolar
CO_2	$D_{\infty h}$	Linear dan memiliki pusat inversi	Nonpolar
C_2H_4	D_{2h}	Memiliki pusat inversi	Nonpolar
Benzena	D_{6h}	Simetri aromatik tinggi	Nonpolar

Hubungan simetri dan polaritas juga dapat dipahami melalui pusat inversi. Molekul yang memiliki pusat inversi tidak dapat memiliki momen dipol permanen karena setiap distribusi muatan pada satu sisi memiliki pasangan ekuivalen di sisi berlawanan. CO_2 , C_2H_4 , dan benzena menjadi contoh penting.

8. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 3

Jawaban mahasiswa harus memuat unsur berikut:

1. Polaritas molekul ditentukan oleh resultan vektor momen dipol.
2. Simetri molekul dapat menyebabkan vektor dipol saling meniadakan.
3. Molekul dengan simetri tinggi cenderung nonpolar jika semua vektor dipol saling meniadakan.
4. Molekul dengan simetri lebih rendah dapat memiliki momen dipol tidak nol.
5. Kelompok titik membantu memprediksi apakah momen dipol diizinkan atau tidak.
6. Molekul dengan pusat inversi tidak memiliki momen dipol permanen.
7. Contoh harus diberikan, misalnya H_2O , NH_3 , CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena.
8. Hubungan simetri dan polaritas tidak boleh ditafsirkan secara terlalu sederhana.

Contoh jawaban yang baik:

Simetri berhubungan dengan polaritas karena momen dipol adalah besaran vektor. Jika simetri molekul menyebabkan semua vektor dipol saling meniadakan, maka momen dipol total molekul menjadi nol dan molekul bersifat nonpolar. Contohnya CO_2 , BF_3 , CH_4 , C_2H_4 , dan benzena. Sebaliknya, jika bentuk molekul tidak memungkinkan vektor dipol saling meniadakan, maka molekul dapat memiliki momen dipol tidak nol, seperti H_2O dan NH_3 . Kelompok titik membantu memprediksi apakah suatu molekul dapat memiliki momen dipol permanen.

Jawaban ini tepat karena menyebut konsep vektor, simetri, kelompok titik, dan contoh.

Jawaban yang kurang tepat:

Semakin simetris molekul, maka molekul pasti nonpolar.

Pernyataan ini terlalu sederhana. Banyak molekul simetris memang nonpolar, tetapi analisis harus tetap mempertimbangkan jenis simetri, distribusi muatan, dan apakah resultan vektor dipol benar-benar nol. Yang lebih tepat adalah bahwa simetri tertentu dapat meniadakan momen dipol permanen.

9. Pertanyaan Diskusi 4: Bagaimana Simetri Memengaruhi Spektrum Molekul?

Pertanyaan keempat berbunyi:

Bagaimana simetri memengaruhi spektrum molekul?

Pertanyaan ini memperluas pembahasan dari polaritas menuju spektroskopi. Simetri molekul memengaruhi spektrum karena transisi vibrasi dan elektronik tidak hanya ditentukan oleh energi, tetapi juga oleh aturan seleksi. Aturan seleksi berkaitan dengan perubahan momen dipol, perubahan polarisabilitas, dan sifat simetri dari mode vibrasi atau fungsi gelombang.

Dalam spektroskopi IR, suatu mode vibrasi aktif jika vibrasi tersebut menyebabkan perubahan momen dipol. Artinya, meskipun suatu molekul tidak memiliki momen dipol permanen, mode vibrasinya tetap dapat aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol.

Secara sederhana:

aktivitas IR
→ terjadi perubahan momen dipol selama vibrasi

Dalam spektroskopi Raman, suatu mode vibrasi aktif jika vibrasi tersebut menyebabkan perubahan polarisabilitas molekul.

Secara sederhana:

aktivitas Raman
→ terjadi perubahan polarisabilitas selama vibrasi

Simetri membantu menentukan mode vibrasi mana yang aktif IR, mana yang aktif Raman, dan mana yang tidak aktif. Dalam teori grup, mode vibrasi diklasifikasikan berdasarkan representasi simetri. Representasi tersebut kemudian dibandingkan dengan transformasi koordinat x , y , z untuk IR, dan fungsi kuadratik seperti x^2 , y^2 , z^2 , xy , xz , yz untuk Raman. Pada tingkat praktikum dasar, mahasiswa tidak harus melakukan seluruh analisis tabel karakter, tetapi harus memahami prinsip dasarnya.

Contoh penting adalah CO_2 . CO_2 tidak memiliki momen dipol permanen karena molekulnya linear dan simetris. Namun, CO_2 tetap memiliki mode vibrasi tertentu yang aktif IR. Regangan simetris CO_2 tidak menghasilkan perubahan momen dipol sehingga tidak aktif IR, sedangkan regangan antisimetri dan mode pembengkokan dapat menghasilkan perubahan momen dipol sehingga aktif IR.

Secara konseptual:

CO_2 pada keadaan setimbang
→ nonpolar

CO_2 saat vibrasi tertentu
→ distribusi muatan berubah
→ momen dipol sesaat dapat muncul
→ mode dapat aktif IR

Ini menunjukkan bahwa “nonpolar” tidak berarti “tidak memiliki spektrum IR”. Molekul nonpolar permanen tetap dapat memiliki mode vibrasi aktif IR jika vibrasi tersebut mengubah momen dipol.

Dalam molekul dengan pusat inversi, seperti CO_2 , C_2H_4 , dan benzena, terdapat prinsip penting dalam spektroskopi vibrasi, yaitu aturan eksklusi IR-Raman. Secara umum, untuk molekul yang memiliki pusat inversi, mode vibrasi yang aktif IR tidak aktif Raman, dan mode yang aktif Raman tidak aktif IR. Pembahasan lengkap membutuhkan teori grup, tetapi gagasan dasarnya penting untuk dikenalkan: **simetri menentukan aktivitas spektrum**.

10. Arah Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 4

Jawaban mahasiswa untuk pertanyaan keempat harus memuat unsur berikut:

1. Simetri memengaruhi spektrum melalui aturan seleksi.
2. Dalam IR, mode vibrasi aktif jika menyebabkan perubahan momen dipol.
3. Dalam Raman, mode vibrasi aktif jika menyebabkan perubahan polarisabilitas.
4. Molekul nonpolar permanen masih dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol.
5. CO_2 adalah contoh penting.
6. Molekul dengan pusat inversi memiliki pola aktivitas IR dan Raman tertentu.
7. Simetri digunakan dalam teori grup untuk mengklasifikasikan mode vibrasi.
8. Simetri juga berpengaruh pada transisi elektronik dan orbital, meskipun pembahasan Praktikum 5 masih bersifat pengantar.

Contoh jawaban yang baik:

Simetri memengaruhi spektrum molekul karena menentukan mode vibrasi atau transisi mana yang diizinkan secara spektroskopi. Dalam spektroskopi IR, suatu mode vibrasi aktif jika menyebabkan perubahan momen dipol. Dalam Raman, mode aktif jika menyebabkan perubahan polarisabilitas. Karena itu, molekul nonpolar seperti CO_2 tetap dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasi tertentu menghasilkan perubahan momen dipol sesaat. Simetri juga membantu menentukan mode mana yang aktif IR atau Raman melalui teori grup dan kelompok titik molekul.

Jawaban ini baik karena menghubungkan simetri, IR, Raman, perubahan momen dipol, polarisabilitas, dan contoh CO_2 .

Jawaban yang kurang tepat:

Molekul nonpolar tidak memiliki spektrum IR.

Pernyataan ini salah karena aktivitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi, bukan hanya pada momen dipol permanen.

11. Hubungan Empat Pertanyaan Diskusi

Keempat pertanyaan diskusi saling berkaitan. Pertanyaan pertama membahas perbandingan CO_2 dan H_2O . Pertanyaan kedua membahas BF_3 sebagai contoh ikatan polar tetapi molekul nonpolar. Pertanyaan ketiga menggeneralisasi hubungan simetri dan polaritas. Pertanyaan keempat memperluas konsep simetri ke spektroskopi.

Hubungan antarkonsep dapat digambarkan sebagai berikut:

bentuk molekul
 → unsur simetri
 → kelompok titik
 → resultan vektor dipol
 → polaritas
 → aktivitas spektrum

H₂O dan NH₃ menunjukkan bahwa bentuk tidak simetris sempurna dapat menghasilkan momen dipol tidak nol. CO₂, BF₃, CH₄, C₂H₄, dan benzena menunjukkan bahwa simetri dapat meniadakan resultan dipol. Spektrum molekul menunjukkan bahwa simetri tidak hanya memengaruhi polaritas permanen, tetapi juga aktivitas vibrasi dan transisi.

Dengan demikian, pertanyaan diskusi tidak boleh dijawab terpisah secara mekanis. Mahasiswa harus melihat bahwa semua pertanyaan membangun satu gagasan besar: **simetri molekul adalah kunci untuk memahami sifat molekul.**

12. Contoh Jawaban Terintegrasi

Mahasiswa dapat menulis jawaban terintegrasi sebagai berikut:

CO₂ nonpolar karena molekulnya linear dan simetris. Meskipun ikatan C=O polar, dua vektor dipol C=O memiliki besar yang sama dan arah berlawanan sehingga resultannya nol. Sebaliknya, H₂O polar karena bentuk molekulnya bengkok. Dua vektor dipol O-H tidak saling meniadakan sehingga momen dipol totalnya tidak nol.

BF₃ juga nonpolar meskipun ikatan B-F polar. Hal ini disebabkan oleh bentuk trigonal planar BF₃. Tiga vektor dipol B-F tersusun simetris dengan sudut 120° sehingga saling meniadakan. Dengan demikian, polaritas molekul tidak hanya ditentukan oleh polaritas ikatan, tetapi oleh resultan vektor dipol yang dipengaruhi oleh simetri molekul.

Simetri berperan penting karena dapat meniadakan atau mempertahankan momen dipol. Molekul dengan simetri tinggi seperti CO₂, BF₃, CH₄, C₂H₄, dan benzena umumnya memiliki momen dipol nol, sedangkan molekul dengan bentuk bengkok atau piramidal seperti H₂O dan NH₃ memiliki momen dipol tidak nol.

Simetri juga memengaruhi spektrum molekul. Dalam spektroskopi IR, suatu mode vibrasi aktif jika menghasilkan perubahan momen dipol. Dalam Raman, suatu mode aktif jika menghasilkan perubahan polarisabilitas. Oleh karena itu, molekul nonpolar permanen tetap dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasinya menyebabkan perubahan momen dipol sesaat.

Jawaban tersebut menunjukkan integrasi konsep. Namun, dalam laporan praktikum, mahasiswa tetap dianjurkan menjawab setiap pertanyaan secara terpisah agar struktur laporan lebih jelas.

13. Rubrik Penilaian Jawaban Diskusi

Jawaban diskusi dapat dinilai menggunakan rubrik berikut:

Aspek Penilaian	Kriteria Jawaban Baik
Definisi konsep	Menjelaskan momen dipol, polaritas, dan simetri dengan benar
Penggunaan teori	Menghubungkan simetri dengan resultan vektor dipol
Ketepatan contoh	Menggunakan CO ₂ , H ₂ O, BF ₃ , dan molekul model lain secara tepat
Data praktikum	Menghubungkan jawaban dengan tabel, grafik, atau output kode
Kelompok titik	Menyebut kelompok titik jika relevan
Analisis vektor	Menjelaskan mengapa vektor dipol saling meniadakan atau tidak
Spektroskopi	Menjelaskan IR dan Raman secara benar
Sikap kritis	Menyebut batas interpretasi dan menghindari klaim berlebihan
Bahasa ilmiah	Menggunakan istilah kimia dengan tepat
Keterpaduan	Jawaban tidak terpisah dari tujuan Praktikum 5

Rubrik ini membantu mahasiswa memahami bahwa jawaban diskusi bukan sekadar benar atau salah secara hafalan. Jawaban harus menunjukkan penalaran ilmiah.

14. Kesalahan Umum dalam Menjawab Pertanyaan Diskusi

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Mengapa Salah
Menulis CO ₂ nonpolar karena ikatan C=O tidak polar	Ikatan C=O polar; resultannya yang nol
Menulis H ₂ O polar hanya karena oksigen elektronegatif	Bentuk bengkok juga harus disebut
Menulis BF ₃ nonpolar karena B–F tidak polar	Ikatan B–F polar; resultan dipol nol karena trigonal planar
Menyamakan polaritas ikatan dengan polaritas molekul	Molekul polar ditentukan oleh resultan vektor
Mengabaikan kelompok titik	Analisis simetri menjadi kurang lengkap
Mengatakan semua molekul simetris pasti nonpolar	Pernyataan terlalu umum dan perlu konteks
Mengatakan molekul nonpolar tidak punya spektrum IR	Aktivitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi
Menyamakan polaritas dengan kiralitas	Polaritas dan kiralitas adalah konsep berbeda
Tidak memakai data praktikum	Jawaban menjadi hafalan
Tidak menyebut batas model Python	Analisis komputasi kurang kritis

Kesalahan-kesalahan ini sering muncul karena mahasiswa menghafal kesimpulan tanpa memahami dasar vektorial dan simetri.

15. Implikasi Keilmuan Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi Praktikum 5 memiliki implikasi keilmuan yang luas. Pertama, mahasiswa memahami bahwa polaritas molekul adalah hasil dari struktur tiga dimensi, bukan hanya dari polaritas ikatan. Kedua, mahasiswa memahami bahwa kelompok titik bukan sekadar simbol, tetapi alat untuk memprediksi sifat molekul. Ketiga, mahasiswa memahami bahwa simetri dapat meniadakan sifat vektorial seperti momen dipol. Keempat, mahasiswa mulai melihat hubungan simetri dengan spektroskopi.

Konsep ini penting dalam banyak bidang kimia. Dalam kimia fisik, polaritas memengaruhi gaya antarmolekul, kelarutan, titik didih, dan interaksi medan listrik. Dalam kimia organik, polaritas dan simetri memengaruhi reaktivitas dan stereokimia. Dalam kimia anorganik, simetri memengaruhi struktur kompleks dan sifat orbital. Dalam spektroskopi, simetri menentukan mode vibrasi dan transisi yang aktif. Dalam kimia material, simetri memengaruhi sifat optik, listrik, dan polar material.

Dengan demikian, pertanyaan diskusi Praktikum 5 tidak hanya relevan untuk bab ini, tetapi menjadi fondasi untuk banyak topik kimia lanjutan.

16. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi

Secara pedagogis, pertanyaan diskusi membantu mahasiswa berpindah dari cara berpikir hafalan menuju cara berpikir konseptual. Mahasiswa tidak cukup menghafal daftar molekul polar dan nonpolar. Mereka harus mampu menjelaskan berdasarkan geometri, kelompok titik, dan resultan vektor dipol.

Pertanyaan CO_2 dan H_2O melatih mahasiswa membedakan bentuk linear dan bengkok. Pertanyaan BF_3 melatih mahasiswa memahami bahwa ikatan polar dapat saling meniadakan jika tersusun simetris. Pertanyaan hubungan simetri dan polaritas melatih mahasiswa berpikir umum. Pertanyaan simetri dan spektrum memperkenalkan bahwa simetri memiliki konsekuensi lebih luas dalam kimia kuantum dan spektroskopi.

Dengan pertanyaan diskusi ini, mahasiswa juga belajar menulis jawaban ilmiah. Jawaban ilmiah tidak cukup berupa satu kalimat. Jawaban harus memiliki definisi, teori, contoh, data, dan kesimpulan.

17. Transisi ke Penutup Bab 8

Subbab 8.10 telah menyajikan pertanyaan diskusi Praktikum 5 dan arah jawaban konseptualnya. Pertanyaan tentang CO_2 dan H_2O menegaskan bahwa bentuk molekul menentukan apakah vektor

dipol saling meniadakan. Pertanyaan tentang BF_3 menegaskan bahwa ikatan polar tidak selalu menghasilkan molekul polar. Pertanyaan tentang hubungan simetri dan polaritas menegaskan bahwa kelompok titik dapat digunakan untuk memprediksi momen dipol permanen. Pertanyaan tentang simetri dan spektrum memperluas pembahasan bahwa simetri juga memengaruhi aktivitas IR, Raman, dan aturan seleksi.

Dengan demikian, Praktikum 5 telah menghubungkan teori simetri molekul dengan data komputasi, analisis vektor, polaritas, dan pengantar spektroskopi. Seluruh rangkaian Bab 8 menunjukkan bahwa simetri bukan sekadar bentuk visual, tetapi prinsip ilmiah yang menjelaskan banyak sifat molekul.

Penutup Bab 8

Bab 8 telah membahas Praktikum 5 tentang **simetri molekul, kelompok titik, dan momen dipol**. Bab ini memperluas pemahaman mahasiswa dari perhitungan struktur elektronik menuju pemahaman geometri molekul, operasi simetri, resultan vektor, polaritas, dan pengantar hubungan simetri dengan spektrum molekul. Jika bab sebelumnya menekankan hubungan antara HOMO-LUMO dan reaktivitas, maka Bab 8 menekankan bahwa sifat molekul juga sangat ditentukan oleh susunan atom dalam ruang dan keteraturan geometrisnya.

Gagasan utama Bab 8 adalah bahwa **polaritas molekul tidak cukup ditentukan oleh polaritas ikatan**, melainkan oleh **resultan seluruh vektor dipol dalam geometri molekul**. Suatu molekul dapat memiliki ikatan polar, tetapi tetap nonpolar jika susunan vektornya saling meniadakan. Sebaliknya, molekul dengan bentuk bengkok atau piramidal dapat memiliki momen dipol tidak nol karena vektor dipolnya tidak saling meniadakan.

Molekul model dalam Bab 8 dipilih untuk memperlihatkan prinsip tersebut secara bertahap. H_2O digunakan sebagai contoh molekul bengkok dan polar. NH_3 digunakan sebagai contoh molekul piramidal trigonal dan polar. BF_3 digunakan sebagai contoh molekul trigonal planar yang memiliki ikatan polar tetapi nonpolar secara keseluruhan. CH_4 digunakan sebagai contoh molekul tetrahedral simetris. CO_2 digunakan sebagai contoh molekul linear dengan dua ikatan polar yang resultannya nol. C_2H_4 digunakan sebagai contoh molekul planar dengan pusat inversi. **Benzena** digunakan sebagai contoh molekul aromatik planar dengan simetri tinggi.

Bab ini juga menegaskan bahwa **kelompok titik** bukan sekadar simbol hafalan. Kelompok titik merupakan bahasa ringkas untuk menyatakan unsur simetri molekul dan memprediksi sifat tertentu. H_2O dengan kelompok titik C_{2v} dapat memiliki momen dipol tidak nol. NH_3 dengan kelompok titik C_{3v} dapat memiliki momen dipol sepanjang sumbu C_3 . Sebaliknya, CO_2 dengan $\text{D}_{\infty h}$, BF_3 dengan D_{3h} , CH_4 dengan T_d , C_2H_4 dengan D_{2h} , dan benzena dengan D_{6h} secara ideal memiliki momen dipol nol karena simetrinya meniadakan resultan vektor dipol.

Praktikum 5 juga memperkenalkan hubungan simetri dengan spektroskopi. Dalam spektroskopi IR, suatu mode vibrasi aktif jika menyebabkan perubahan momen dipol. Dalam spektroskopi Raman, suatu mode aktif jika menyebabkan perubahan polarisabilitas. Dengan demikian, simetri tidak hanya menjelaskan polaritas permanen molekul, tetapi juga membantu memahami aktivitas spektrum, aturan seleksi, dan karakter vibrasi molekul.

Melalui jalur ChemCompute, mahasiswa belajar menjalankan optimasi geometri dan membaca momen dipol dari output perhitungan. Melalui jalur Python mandiri, mahasiswa belajar menghitung pusat massa, menghitung vektor dipol sederhana dari muatan parsial, memvisualisasikan vektor dipol, membuat grafik batang, menyimpan CSV, dan menyusun tabel kelompok titik. Kedua jalur ini saling melengkapi. ChemCompute memberikan hasil komputasi struktur elektronik, sedangkan Python memperjelas logika vektorial di balik momen dipol.

Dengan demikian, Bab 8 membangun kemampuan penting dalam kimia kuantum praktis: membaca molekul sebagai objek tiga dimensi, mengenali simetri, memahami momen dipol sebagai vektor, menghubungkan kelompok titik dengan polaritas, serta menafsirkan output komputasi secara kritis.

Rangkuman Bab 8

1. **Simetri molekul** adalah keteraturan susunan atom yang membuat molekul tetap ekuivalen setelah dikenai operasi tertentu, seperti rotasi, refleksi, inversi, atau rotasi-refleksi.
2. **Operasi simetri** adalah tindakan terhadap molekul, sedangkan **unsur simetri** adalah objek geometris yang menjadi acuan operasi tersebut.
3. Unsur simetri penting meliputi identitas E , sumbu rotasi proper C_n , bidang cermin σ , pusat inversi i , dan sumbu rotasi tidak proper S_n .
4. **Kelompok titik** adalah kumpulan operasi simetri molekul yang meninggalkan setidaknya satu titik tetap.
5. Kelompok titik yang dibahas dalam Bab 8 meliputi C_{2v} , C_{3v} , D_{3h} , T_d , $D_{\infty h}$, D_{2h} , dan D_{6h} .
6. **Momen dipol** adalah besaran vektor yang menggambarkan pemisahan muatan dalam molekul.
7. Molekul bersifat **polar** jika resultan momen dipolnya tidak nol.
8. Molekul bersifat **nonpolar** jika resultan momen dipolnya nol atau mendekati nol.
9. Molekul dengan ikatan polar belum tentu polar karena vektor dipol ikatan dapat saling meniadakan.
10. H_2O polar karena berbentuk bengkok sehingga vektor dipol O–H tidak saling meniadakan.
11. NH_3 polar karena berbentuk piramidal trigonal sehingga vektor dipol N–H memiliki resultan tidak nol.
12. CO_2 nonpolar karena berbentuk linear sehingga dua vektor dipol C=O sama besar dan berlawanan arah.
13. BF_3 nonpolar karena berbentuk trigonal planar sehingga tiga vektor dipol B–F saling meniadakan.
14. CH_4 nonpolar karena struktur tetrahedralnya sangat simetris.
15. C_2H_4 nonpolar karena memiliki struktur planar dan pusat inversi.
16. Benzena nonpolar karena memiliki simetri aromatik planar yang tinggi dan termasuk kelompok titik D_{6h} .
17. ChemCompute digunakan untuk optimasi geometri dan perhitungan momen dipol melalui paket komputasi yang tersedia.
18. Python digunakan untuk menghitung pusat massa, vektor dipol sederhana, klasifikasi polar/nonpolar, visualisasi vektor dipol, grafik batang, dan file CSV.

19. Simetri memengaruhi spektrum molekul karena menentukan mode vibrasi yang aktif IR atau Raman.
20. Aktivitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi, sedangkan aktivitas Raman berkaitan dengan perubahan polarisabilitas.

Sintesis Gagasan Utama Bab 8

Bab 8 menyatukan tiga gagasan besar: **geometri**, **simetri**, dan **sifat molekul**. Geometri menjelaskan susunan atom dalam ruang. Simetri menjelaskan keteraturan susunan tersebut. Sifat molekul, seperti polaritas dan aktivitas spektrum, muncul sebagai konsekuensi dari geometri dan simetri.

Hubungan tersebut dapat diringkas sebagai berikut:

```
struktur molekul
→ unsur simetri
→ kelompok titik
→ resultan vektor dipol
→ polaritas
→ implikasi spektroskopi
```

H₂O dan CO₂ menjadi contoh perbandingan utama. Keduanya memiliki tiga atom dan ikatan polar, tetapi polaritasnya berbeda karena bentuknya berbeda. H₂O bengkok sehingga polar, sedangkan CO₂ linear sehingga nonpolar. Perbandingan ini memperlihatkan bahwa bentuk molekul sangat menentukan resultan vektor dipol.

NH₃ dan BF₃ menjadi contoh perbandingan kedua. Keduanya memiliki tiga atom terminal di sekitar atom pusat, tetapi NH₃ piramidal trigonal dan polar, sedangkan BF₃ trigonal planar dan nonpolar. Perbandingan ini memperlihatkan bahwa jumlah atom terminal tidak cukup untuk menentukan polaritas. Struktur tiga dimensi dan simetri harus diperhatikan.

CH₄, C₂H₄, dan benzena memperlihatkan bahwa simetri tinggi dapat meniadakan momen dipol permanen. CH₄ nonpolar karena simetri tetrahedral. C₂H₄ nonpolar karena pusat inversi dan simetri planar. Benzena nonpolar karena simetri aromatik tinggi.

Dengan demikian, Bab 8 membangun pemahaman bahwa simetri molekul bukan konsep tambahan, melainkan fondasi penting untuk memahami polaritas, spektroskopi, dan sifat molekul.

Implikasi Keilmuan Bab 8

Bab 8 memiliki beberapa implikasi keilmuan penting.

Pertama, bab ini menegaskan bahwa molekul harus dipahami sebagai objek tiga dimensi. Gambar struktur dua dimensi sering tidak cukup untuk menjelaskan polaritas. NH_3 dan BF_3 menjadi contoh jelas bahwa bentuk tiga dimensi menentukan apakah vektor dipol saling meniadakan atau tidak.

Kedua, bab ini menunjukkan bahwa kelompok titik memiliki nilai prediktif. Dari kelompok titik, mahasiswa dapat memperkirakan apakah suatu molekul mungkin memiliki momen dipol permanen. Kelompok titik seperti C_{2v} dan C_{3v} memungkinkan momen dipol, sedangkan kelompok titik dengan simetri tinggi atau pusat inversi sering meniadakannya.

Ketiga, bab ini menunjukkan bahwa momen dipol adalah besaran vektor. Mahasiswa harus membaca momen dipol bukan hanya sebagai angka, tetapi sebagai resultan arah dan besar dari distribusi muatan.

Keempat, bab ini memperkenalkan hubungan simetri dengan spektroskopi. Simetri membantu menentukan mode vibrasi yang aktif IR atau Raman. Dengan demikian, Praktikum 5 menjadi pengantar penting untuk bab-bab lanjutan tentang vibrasi, spektrum IR, Raman, dan sifat optik molekul.

Kelima, bab ini memperlihatkan pentingnya berpikir kritis terhadap hasil komputasi. Nilai momen dipol yang sangat kecil pada molekul simetris harus ditafsirkan dalam konteks toleransi numerik, kualitas geometri, dan simetri ideal.

Implikasi Praktis Bab 8

Secara praktis, Bab 8 membekali mahasiswa dengan kemampuan berikut:

1. Menggambar struktur molekul model dengan benar.
2. Memvisualisasikan molekul dalam ruang tiga dimensi.
3. Mengenali unsur simetri seperti sumbu rotasi, bidang cermin, dan pusat inversi.
4. Menentukan kelompok titik molekul sederhana.
5. Menjelaskan hubungan kelompok titik dengan polaritas molekul.
6. Menjalankan optimasi geometri dan membaca momen dipol dari output ChemCompute atau software struktur elektronik.
7. Menggunakan Python untuk menghitung pusat massa dan vektor dipol sederhana.
8. Menghasilkan tabel molekul, kelompok titik, momen dipol, dan klasifikasi polar/nonpolar.
9. Membuat grafik batang momen dipol.
10. Memvisualisasikan vektor dipol.
11. Membandingkan hasil Python dengan hasil ChemCompute.
12. Menulis analisis ilmiah yang menghubungkan data komputasi dengan teori simetri.

Keterampilan ini penting karena banyak topik kimia lanjutan membutuhkan pemahaman simetri. Spektroskopi IR, Raman, NMR, kristalografi, stereokimia, orbital molekul, kompleks koordinasi, dan kimia material semuanya memerlukan kemampuan membaca simetri.

Keterbatasan Pembahasan Bab 8

Bab 8 sengaja membatasi pembahasan pada tingkat praktikum dasar. Beberapa keterbatasan perlu disadari.

Pertama, penentuan kelompok titik pada Bab 8 dilakukan secara manual dan berbantuan software sederhana. Pembahasan belum memasuki teori grup formal secara lengkap, seperti penyusunan tabel karakter, representasi tereduksi, dan dekomposisi representasi.

Kedua, perhitungan momen dipol Python menggunakan model muatan parsial titik. Model ini berguna untuk memahami vektor dipol, tetapi tidak menggantikan perhitungan distribusi elektron kuantum.

Ketiga, nilai momen dipol dari output komputasi bergantung pada metode, basis set, geometri, dan status optimasi. Karena itu, hasil harus selalu ditafsirkan bersama informasi metodologis.

Keempat, molekul model yang digunakan relatif sederhana. Molekul nyata yang lebih besar dapat memiliki simetri lebih rendah, konformasi berbeda, dan pengaruh lingkungan seperti pelarut atau fase padat.

Kelima, pembahasan hubungan simetri dengan spektrum masih bersifat pengantar. Analisis lengkap aktivitas IR dan Raman memerlukan teori grup yang lebih formal dan tabel karakter.

Keenam, Bab 8 belum membahas kiralitas secara mendalam. Aktivitas optik hanya diperkenalkan sebagai konsekuensi simetri. Pembahasan kiralitas yang lebih lengkap memerlukan molekul model kiral dan analisis stereokimia lebih lanjut.

Dengan memahami keterbatasan tersebut, mahasiswa diharapkan tidak menafsirkan hasil praktikum secara berlebihan. Hasil Praktikum 5 harus dibaca sebagai fondasi konseptual dan komputasional untuk topik yang lebih lanjut.

Arah Menuju Bab Berikutnya

Setelah Bab 8 membahas simetri molekul, kelompok titik, dan momen dipol, bab berikutnya dapat diarahkan pada sifat molekul yang lebih berkaitan dengan vibrasi, spektrum, atau interaksi molekul. Jika Bab 8 menekankan bahwa simetri menentukan polaritas dan memengaruhi aktivitas spektrum, maka bab berikutnya dapat mengembangkan pembahasan menuju **frekuensi vibrasi, spektrum IR, Raman, atau analisis termokimia**, sesuai susunan buku.

Dengan bekal Bab 8, mahasiswa telah memahami bahwa struktur molekul tidak boleh hanya dilihat sebagai gambar statis. Struktur molekul memiliki simetri, simetri memengaruhi vektor

dipol, vektor dipol menentukan polaritas, dan perubahan momen dipol selama vibrasi berhubungan dengan aktivitas spektrum. Pemahaman ini menjadi fondasi penting untuk praktikum kimia kuantum lanjutan.

Daftar Pustaka Bab 8

Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular Quantum Mechanics* (5th ed.). Oxford University Press.

Bishop, D. M. (1973). *Group Theory and Chemistry*. Clarendon Press.

Carter, R. L. (1998). *Molecular Symmetry and Group Theory*. John Wiley & Sons.

Cotton, F. A. (1990). *Chemical Applications of Group Theory* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Foresman, J. B., & Frisch, A. E. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Hanson, R. M. (2010). Jmol — a paradigm shift in crystallographic visualization. *Journal of Applied Crystallography*, 43(5), 1250–1260.

Harris, D. C., & Bertolucci, M. D. (1989). *Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*. Dover Publications.

Harris, C. R., Millman, K. J., van der Walt, S. J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N. J., Kern, R., Picus, M., Hoyer, S., van Kerkwijk, M. H., Brett, M., Haldane, A., del Río, J. F., Wiebe, M., Peterson, P., Gérard-Marchant, P., Sheppard, K., Reddy, T., Weckesser, W., Abbasi, H., Gohlke, C., & Oliphant, T. E. (2020). Array programming with NumPy. *Nature*, 585, 357–362.

Herzberg, G. (1945). *Molecular Spectra and Molecular Structure II: Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*. D. Van Nostrand.

Hollas, J. M. (2004). *Modern Spectroscopy* (4th ed.). John Wiley & Sons.

Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, 9(3), 90–95.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Prentice Hall.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.

Lewars, E. G. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (3rd ed.). Springer.

McKinney, W. (2010). Data structures for statistical computing in Python. In S. van der Walt & J. Millman (Eds.), *Proceedings of the 9th Python in Science Conference* (pp. 56–61).

McQuarrie, D. A., & Simon, J. D. (1997). *Physical Chemistry: A Molecular Approach*. University Science Books.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.

Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system—Version 5.0. *WIREs Computational Molecular Science*, 12(5), e1606.

Wilson, E. B., Decius, J. C., & Cross, P. C. (1955). *Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*. McGraw-Hill.

Young, D. C. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. John Wiley & Sons.

BAB 9

PRAKTIKUM 6: FREKUENSI VIBRASI DAN SPEKTRUM IR KOMPUTASI

Pengantar Bab 9

Bab 9 membahas Praktikum 6 tentang **frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi**. Bab ini melanjutkan pembahasan Bab 8 yang telah memperkenalkan hubungan antara simetri molekul, kelompok titik, momen dipol, dan pengantar aktivitas spektrum. Jika Bab 8 menekankan bahwa simetri dapat menentukan apakah suatu molekul memiliki momen dipol permanen, maka Bab 9 memperluas pembahasan menuju pertanyaan yang lebih dinamis: **bagaimana atom-atom dalam molekul bergetar, bagaimana getaran tersebut menghasilkan frekuensi vibrasi, dan bagaimana frekuensi tersebut muncul sebagai puncak pada spektrum inframerah atau IR.**

Spektrum IR merupakan salah satu alat penting dalam kimia karena dapat digunakan untuk mengenali gugus fungsi, mempelajari kekuatan ikatan, membandingkan struktur molekul, dan memvalidasi hasil perhitungan komputasi. Dalam laboratorium kimia eksperimental, spektrum IR sering dipakai untuk mengidentifikasi keberadaan ikatan O–H, N–H, C–H, C=O, C–O, dan ikatan lainnya. Dalam kimia komputasi, spektrum IR dapat disimulasikan melalui perhitungan frekuensi vibrasi. Hasil simulasi ini kemudian dapat dibandingkan dengan spektrum eksperimen atau digunakan untuk memprediksi pola vibrasi molekul.

Secara historis, kajian vibrasi molekul berkembang dari mekanika klasik, teori osilator harmonik, spektroskopi inframerah, dan mekanika kuantum. Buku klasik seperti karya Wilson, Decius, dan Cross tentang vibrasi molekul, Herzberg tentang spektrum molekul, serta Harris dan Bertolucci tentang simetri dan spektroskopi menunjukkan bahwa vibrasi molekul tidak dapat dipahami hanya sebagai gerakan atom sederhana. Vibrasi molekul harus dianalisis melalui **mode normal**, yaitu pola gerakan kolektif atom-atom dalam molekul yang terjadi pada frekuensi tertentu. Dalam kimia komputasi modern, konsep ini kemudian diterapkan melalui perhitungan Hessian, frekuensi harmonik, intensitas IR, dan analisis mode normal.

Praktikum 6 bertujuan memberikan pengalaman awal kepada mahasiswa untuk menghitung frekuensi vibrasi dan menafsirkan spektrum IR hasil komputasi. Molekul model yang digunakan adalah **H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton**. Molekul-molekul ini dipilih karena mengandung gugus dan ikatan yang penting dalam interpretasi IR. H₂O memperlihatkan vibrasi O–H dan pembengkokan molekul kecil. CO₂ memperlihatkan contoh molekul linear dengan mode vibrasi tertentu yang aktif IR. NH₃ memperkenalkan vibrasi N–H. Formaldehida dan aseton memperkenalkan puncak C=O. Etanol memperkenalkan O–H, C–H, C–O, serta pengaruh struktur organik sederhana terhadap spektrum IR.

Dalam jalur ChemCompute, mahasiswa menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi. Output yang diperoleh memuat daftar frekuensi vibrasi, intensitas IR, dan informasi

mode normal. Dalam jalur Python mandiri, mahasiswa memasukkan daftar frekuensi dan intensitas, membuat spektrum IR simulasi, menerapkan faktor skala, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan dua spektrum molekul, dan menyimpan hasil analisis dalam CSV. Dengan demikian, Praktikum 6 tidak hanya mengajarkan cara membaca angka frekuensi, tetapi juga cara membangun spektrum, membaca puncak, dan menghubungkannya dengan jenis ikatan.

Bab 9 juga memperkenalkan konsep penting tentang **frekuensi imajiner**. Dalam perhitungan frekuensi, adanya frekuensi imajiner sering menunjukkan bahwa struktur yang dihitung belum merupakan minimum energi sejati pada permukaan energi potensial. Struktur dengan frekuensi imajiner dapat mengindikasikan geometri belum stabil atau berada pada titik sadel. Oleh karena itu, perhitungan frekuensi bukan hanya menghasilkan spektrum IR, tetapi juga menjadi alat validasi apakah geometri hasil optimasi benar-benar merupakan minimum.

Dengan demikian, Bab 9 memiliki posisi penting dalam buku ini. Bab ini menghubungkan optimasi geometri, mekanika vibrasi, spektroskopi IR, validasi struktur, simulasi spektrum, dan interpretasi gugus fungsi. Mahasiswa diarahkan agar tidak hanya mengenali puncak IR secara hafalan, tetapi memahami mengapa puncak tertentu muncul pada daerah frekuensi tertentu, mengapa intensitas suatu puncak dapat kuat, mengapa frekuensi komputasi perlu faktor skala, dan bagaimana data komputasi digunakan secara kritis.

9.1 Tujuan Praktikum

Tujuan utama Praktikum 6 adalah agar mahasiswa mampu **menghitung frekuensi vibrasi, mengenali mode normal, dan menafsirkan spektrum IR hasil komputasi**. Tujuan ini mencakup tiga ranah kemampuan yang saling berkaitan: kemampuan komputasional, kemampuan konseptual, dan kemampuan interpretatif. Mahasiswa tidak hanya diminta menjalankan perhitungan, tetapi juga harus memahami makna frekuensi vibrasi, mode normal, intensitas IR, puncak spektrum, faktor skala, dan frekuensi imajiner.

Dalam praktikum kimia kuantum, perhitungan frekuensi merupakan salah satu tahap penting setelah optimasi geometri. Optimasi geometri memberikan struktur molekul pada titik energi minimum menurut metode perhitungan yang digunakan. Namun, struktur yang tampak teroptimasi belum tentu benar-benar minimum. Perhitungan frekuensi membantu memeriksa hal tersebut. Jika semua frekuensi nyata dan positif, struktur biasanya dapat dianggap sebagai minimum lokal. Jika terdapat frekuensi imajiner, struktur tersebut perlu diperiksa kembali karena kemungkinan berada pada titik sadel atau belum stabil.

Selain sebagai alat validasi struktur, perhitungan frekuensi juga menghasilkan informasi spektroskopi. Setiap mode vibrasi memiliki frekuensi dan intensitas IR. Frekuensi berkaitan dengan energi vibrasi, massa atom, dan kekuatan ikatan. Intensitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi. Dengan demikian, spektrum IR komputasi merupakan jembatan antara struktur molekul, gerakan atom, dan sifat spektroskopi.

1. Memahami Frekuensi Vibrasi sebagai Gerak Molekul

Tujuan pertama Praktikum 6 adalah agar mahasiswa memahami bahwa molekul tidak diam. Atom-atom dalam molekul selalu mengalami gerak vibrasi di sekitar posisi kesetimbangan. Dalam model harmonik, ikatan kimia dapat dipandang seperti pegas yang menghubungkan atom-atom. Jika ikatan diregangkan atau dibengkokkan, terdapat gaya pemulih yang berusaha mengembalikan sistem ke posisi setimbang.

Secara sederhana, frekuensi vibrasi bergantung pada dua faktor utama:

1. **Kekuatan ikatan**
2. **Massa atom yang bergetar**

Ikatan yang lebih kuat cenderung menghasilkan frekuensi vibrasi lebih tinggi. Atom yang lebih ringan juga cenderung menghasilkan frekuensi vibrasi lebih tinggi. Inilah alasan mengapa vibrasi O–H dan N–H muncul pada daerah frekuensi tinggi, sedangkan vibrasi ikatan yang melibatkan atom lebih berat atau ikatan lebih lemah muncul pada frekuensi lebih rendah.

Secara konseptual, hubungan tersebut dapat digambarkan sebagai berikut:

ikatan kuat + atom ringan
→ frekuensi vibrasi tinggi

ikatan lemah + atom berat
→ frekuensi vibrasi rendah

Dalam Praktikum 6, mahasiswa akan melihat bahwa regangan O–H pada H₂O atau etanol muncul pada frekuensi tinggi, regangan N–H pada NH₃ juga berada pada daerah tinggi, regangan C=O pada formaldehida dan aseton muncul kuat pada daerah khas karbonil, sedangkan vibrasi C–O dan mode pembengkokan sering muncul pada frekuensi lebih rendah.

Tujuan pembelajaran ini penting karena mahasiswa harus memahami bahwa puncak IR bukan sekadar tanda identifikasi gugus fungsi. Puncak IR adalah manifestasi gerak vibrasi molekul yang memiliki dasar mekanika.

2. Memahami Mode Normal Molekul

Tujuan kedua adalah agar mahasiswa mampu mengenali **mode normal**. Mode normal adalah pola vibrasi kolektif atom-atom dalam molekul yang terjadi pada frekuensi tertentu. Dalam satu mode normal, semua atom bergerak secara terkoordinasi dengan fase dan amplitudo tertentu. Mode normal bukan gerakan satu ikatan saja, walaupun dalam interpretasi sederhana sering dikaitkan dengan jenis ikatan dominan.

Misalnya, dalam molekul H₂O terdapat mode regangan O–H simetris, regangan O–H antisimetri, dan pembengkokan H–O–H. Dalam CO₂ terdapat mode regangan simetris, regangan antisimetri,

dan mode pembengkokan. Dalam molekul organik seperti formaldehida, etanol, dan aseton, mode normal dapat lebih kompleks karena banyak atom bergerak sekaligus.

Secara umum, jumlah mode vibrasi untuk molekul nonlinier adalah:

$$\text{jumlah mode vibrasi} = 3N - 6$$

Untuk molekul linear:

$$\text{jumlah mode vibrasi} = 3N - 5$$

Dalam rumus tersebut, N adalah jumlah atom dalam molekul. Perbedaan antara molekul linear dan nonlinier muncul karena molekul linear memiliki dua derajat rotasi, sedangkan molekul nonlinier memiliki tiga derajat rotasi.

Contoh:

Molekul	Jumlah Atom	Bentuk	Jumlah Mode Vibrasi
H ₂ O	3	Nonlinier	$3N - 6 = 3$
CO ₂	3	Linear	$3N - 5 = 4$
NH ₃	4	Nonlinier	$3N - 6 = 6$
Formaldehida	4	Nonlinier	$3N - 6 = 6$
Etanol	9	Nonlinier	$3N - 6 = 21$
Aseton	10	Nonlinier	$3N - 6 = 24$

Mahasiswa harus memahami bahwa jumlah mode normal bertambah seiring bertambahnya jumlah atom. Karena itu, spektrum molekul kecil lebih sederhana, sedangkan spektrum molekul organik lebih kompleks.

3. Menghitung Frekuensi Vibrasi melalui Perhitungan Komputasi

Tujuan ketiga adalah agar mahasiswa mampu menjalankan perhitungan frekuensi vibrasi melalui software kimia komputasi. Dalam Praktikum 6, perhitungan dilakukan setelah optimasi geometri. Tahap umum perhitungan adalah:

```
struktur awal
→ optimasi geometri
→ struktur teroptimasi
→ perhitungan frekuensi
→ daftar frekuensi dan intensitas IR
→ spektrum IR simulasi
```

Perhitungan frekuensi dilakukan dengan menghitung turunan kedua energi terhadap koordinat atom. Secara komputasional, informasi ini berkaitan dengan matriks Hessian. Dari Hessian yang telah diproses dengan massa atom, diperoleh frekuensi normal molekul. Pada tingkat praktikum

dasar, mahasiswa tidak perlu menurunkan persamaan Hessian secara matematis lengkap, tetapi harus memahami bahwa frekuensi vibrasi berasal dari kelengkungan permukaan energi potensial di sekitar struktur teroptimasi.

Jika permukaan energi potensial sangat curam terhadap perubahan koordinat tertentu, frekuensi vibrasi pada mode tersebut cenderung tinggi. Jika permukaan energi potensial lebih landai, frekuensi cenderung lebih rendah. Inilah sebabnya ikatan kuat seperti O–H dan C=O memiliki frekuensi khas yang relatif tinggi dibanding banyak mode deformasi atau pembengkokan.

Dalam laporan praktikum, mahasiswa perlu menulis metode perhitungan frekuensi secara jelas, misalnya:

Optimasi geometri dan perhitungan frekuensi dilakukan dengan metode DFT menggunakan fungsional dan basis set yang sama. Frekuensi vibrasi dan intensitas IR diambil dari output hasil perhitungan.

Jika metode dan basis set tidak dicatat, hasil spektrum tidak dapat dievaluasi secara ilmiah.

4. Mengenali Intensitas IR

Tujuan keempat adalah agar mahasiswa mampu memahami dan membaca **intensitas IR**. Frekuensi vibrasi menunjukkan posisi puncak pada sumbu bilangan gelombang, sedangkan intensitas IR menunjukkan seberapa kuat mode tersebut menyerap radiasi inframerah.

Dalam spektroskopi IR, suatu vibrasi aktif jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol molekul. Dengan kata lain, mode vibrasi yang tidak mengubah momen dipol tidak akan menyerap IR secara kuat, meskipun mode tersebut tetap ada secara mekanik.

Secara sederhana:

perubahan momen dipol selama vibrasi
→ mode aktif IR
→ puncak IR muncul

Sebaliknya:

tidak ada perubahan momen dipol selama vibrasi
→ mode tidak aktif atau sangat lemah pada IR

Konsep ini menghubungkan Bab 8 dan Bab 9. Pada Bab 8, mahasiswa mempelajari momen dipol permanen. Pada Bab 9, mahasiswa mempelajari perubahan momen dipol selama vibrasi. Keduanya berkaitan, tetapi tidak identik. Molekul yang tidak memiliki momen dipol permanen tetap dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasi tertentu menghasilkan perubahan momen dipol sesaat.

CO₂ menjadi contoh penting. CO₂ nonpolar pada keadaan setimbang. Namun, beberapa mode vibrasinya aktif IR karena selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol. Ini menunjukkan bahwa analisis IR membutuhkan pemahaman dinamis, bukan hanya polaritas statis.

5. Menafsirkan Spektrum IR Hasil Komputasi

Tujuan kelima adalah agar mahasiswa mampu menafsirkan spektrum IR hasil komputasi. Spektrum IR simulasi biasanya menampilkan sumbu horizontal berupa bilangan gelombang dalam cm^{-1} dan sumbu vertikal berupa intensitas atau absorbansi relatif. Puncak pada spektrum menunjukkan frekuensi vibrasi yang aktif IR.

Mahasiswa harus mampu menghubungkan puncak IR dengan jenis ikatan atau gugus fungsi. Contoh umum:

Daerah Frekuensi Umum	Jenis Vibrasi yang Sering Dikaitkan
3200–3700 cm^{-1}	Regangan O–H atau N–H
2800–3100 cm^{-1}	Regangan C–H
1650–1800 cm^{-1}	Regangan C=O
1000–1300 cm^{-1}	Regangan C–O
< 1500 cm^{-1}	Daerah fingerprint dan berbagai mode deformasi

Rentang tersebut harus dipahami sebagai panduan umum, bukan aturan mutlak. Posisi puncak dapat bergeser akibat lingkungan kimia, ikatan hidrogen, konjugasi, substituen, metode komputasi, basis set, dan faktor skala.

Dalam Praktikum 6, mahasiswa akan menghubungkan puncak IR dengan ikatan O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O. Misalnya, etanol memiliki O–H, C–H, dan C–O, sehingga spektrumnya lebih kompleks daripada H₂O atau CO₂. Aseton memiliki gugus C=O yang umumnya menghasilkan puncak kuat. Formaldehida juga memiliki C=O dan C–H. Dengan membandingkan molekul model, mahasiswa belajar bahwa spektrum IR merupakan sidik jari struktur molekul.

6. Memahami Frekuensi Imajiner sebagai Validasi Struktur

Tujuan keenam adalah agar mahasiswa memahami makna **frekuensi imajiner**. Dalam output komputasi, frekuensi imajiner sering ditampilkan sebagai nilai negatif atau ditandai dengan simbol tertentu, bergantung software. Secara fisik, frekuensi imajiner menunjukkan bahwa struktur yang dianalisis bukan minimum energi sejati pada semua arah koordinat. Struktur tersebut dapat berada pada titik sadel atau belum teroptimasi dengan benar.

Dalam optimasi geometri, struktur minimum seharusnya memiliki semua frekuensi nyata. Jika terdapat satu frekuensi imajiner, struktur mungkin merupakan keadaan transisi orde pertama. Jika

terdapat lebih dari satu frekuensi imajiner, struktur kemungkinan belum teroptimasi dengan baik atau berada pada titik sadel yang lebih tinggi.

Secara ringkas:

semua frekuensi nyata
→ struktur kemungkinan minimum lokal

satu frekuensi imajiner
→ kemungkinan keadaan transisi

lebih dari satu frekuensi imajiner
→ struktur perlu diperiksa ulang

Dalam Praktikum 6, mahasiswa tidak berfokus pada pencarian keadaan transisi. Karena itu, jika molekul model seperti H_2O , CO_2 , NH_3 , formaldehida, etanol, atau aseton menghasilkan frekuensi imajiner, mahasiswa harus memeriksa ulang optimasi geometri. Kemungkinan struktur awal kurang baik, optimasi belum konvergen, atau perhitungan frekuensi dilakukan sebelum struktur benar-benar minimum.

Tujuan ini penting karena perhitungan frekuensi bukan hanya untuk membuat spektrum IR, tetapi juga untuk memvalidasi struktur molekul hasil optimasi.

7. Memahami Faktor Skala pada Frekuensi Komputasi

Tujuan ketujuh adalah agar mahasiswa memahami bahwa frekuensi komputasi sering memerlukan **faktor skala**. Frekuensi harmonik hasil perhitungan biasanya tidak selalu sama persis dengan frekuensi eksperimen. Ada beberapa penyebab.

Pertama, banyak perhitungan frekuensi menggunakan pendekatan harmonik, sedangkan vibrasi molekul nyata bersifat anharmonik. Kedua, metode dan basis set memiliki keterbatasan. Ketiga, efek lingkungan seperti pelarut, fase, ikatan hidrogen, dan interaksi antarmolekul sering tidak sepenuhnya diperhitungkan dalam model gas fase tunggal. Keempat, permukaan energi potensial hasil metode komputasi dapat sedikit berbeda dari realitas eksperimen.

Karena itu, frekuensi komputasi sering dikoreksi dengan faktor skala:

frekuensi terkoreksi = faktor skala $\times$ frekuensi komputasi

Contoh:

frekuensi komputasi = 1800 cm^{-1}
faktor skala = 0,96

frekuensi terkoreksi = $0,96 \times 1800 = 1728 \text{ cm}^{-1}$

Dalam Praktikum 6, Python digunakan untuk menerapkan faktor skala. Mahasiswa harus memahami bahwa faktor skala bukan manipulasi data sembarangan, tetapi koreksi empiris yang umum digunakan dalam interpretasi frekuensi komputasi. Namun, faktor skala harus dipilih secara bertanggung jawab dan disebutkan dalam laporan.

8. Membandingkan Spektrum Dua Molekul

Tujuan kedelapan adalah agar mahasiswa mampu membandingkan spektrum dua molekul. Perbandingan spektrum penting karena spektrum IR sangat berguna untuk membedakan gugus fungsi. Misalnya, formaldehida dan aseton sama-sama memiliki gugus C=O, tetapi lingkungan kimianya berbeda. Etanol memiliki gugus O–H dan C–O, sedangkan aseton memiliki C=O tetapi tidak memiliki O–H. H₂O dan NH₃ memperlihatkan vibrasi X–H pada daerah tinggi, tetapi jenis atom pusatnya berbeda.

Dalam jalur Python mandiri, mahasiswa akan membuat spektrum IR simulasi dari daftar frekuensi dan intensitas. Spektrum dua molekul dapat ditumpangkan atau dibandingkan dalam grafik terpisah. Tujuan perbandingan bukan hanya melihat grafik mana yang lebih tinggi, tetapi menghubungkan puncak dengan struktur molekul.

Contoh perbandingan:

Perbandingan	Fokus Analisis
H ₂ O vs NH ₃	O–H dan N–H, mode molekul kecil
CO ₂ vs H ₂ O	Molekul linear vs bengkok, aktivitas IR
Formaldehida vs aseton	Puncak C=O dan pengaruh lingkungan karbonil
Etanol vs aseton	O–H dan C–O pada etanol, C=O pada aseton

Perbandingan spektrum membantu mahasiswa memahami bahwa spektrum IR adalah alat identifikasi struktur. Molekul yang memiliki gugus fungsi berbeda akan menunjukkan pola puncak berbeda.

9. Molekul Model sebagai Sarana Mencapai Tujuan Praktikum

Molekul model dalam Praktikum 6 dipilih untuk mencapai tujuan praktikum secara bertahap.

H₂O digunakan untuk mengenalkan mode vibrasi sederhana pada molekul nonlinier triatomik. H₂O memiliki tiga mode vibrasi, yaitu regangan simetris, regangan antisimetri, dan pembengkokan.

CO₂ digunakan untuk mengenalkan molekul linear dan konsep mode vibrasi aktif IR. CO₂ memiliki mode vibrasi yang penting untuk memahami hubungan antara perubahan momen dipol dan aktivitas IR.

NH₃ digunakan untuk mengenalkan vibrasi N–H dan mode normal pada molekul piramidal trigonal.

Formaldehida digunakan untuk memperkenalkan gugus karbonil C=O pada molekul kecil. Puncak C=O biasanya kuat dalam IR karena vibrasi karbonil menghasilkan perubahan momen dipol yang signifikan.

Etanol digunakan untuk mengenalkan gugus O–H, C–H, dan C–O dalam satu molekul organik sederhana. Spektrum etanol memperlihatkan bahwa molekul organik dapat memiliki banyak puncak karena banyak jenis ikatan.

Aseton digunakan untuk mengenalkan karbonil keton dan perbandingan dengan formaldehida serta etanol. Aseton memiliki puncak C=O yang penting dalam interpretasi IR.

Dengan molekul model tersebut, mahasiswa tidak hanya mempelajari teori vibrasi secara abstrak, tetapi melihat langsung bagaimana teori muncul dalam data spektrum.

10. Indikator Keberhasilan Praktikum

Setelah menyelesaikan Praktikum 6, mahasiswa diharapkan mampu mencapai indikator berikut:

1. Menjelaskan pengertian frekuensi vibrasi.
2. Menjelaskan pengertian mode normal.
3. Membedakan molekul linear dan nonlinier dalam konteks jumlah mode vibrasi.
4. Menghitung jumlah mode vibrasi dengan rumus $3N - 6$ dan $3N - 5$.
5. Menjelaskan hubungan kekuatan ikatan dengan frekuensi vibrasi.
6. Menjelaskan hubungan massa atom dengan frekuensi vibrasi.
7. Menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi.
8. Membaca daftar frekuensi vibrasi dari output komputasi.
9. Membaca intensitas IR dari output komputasi.
10. Mengenali frekuensi imajiner dan maknanya.
11. Membuat spektrum IR simulasi menggunakan Python.
12. Menerapkan faktor skala pada frekuensi komputasi.
13. Mengidentifikasi puncak utama dalam spektrum IR.
14. Menghubungkan puncak IR dengan ikatan O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O.
15. Membandingkan spektrum dua molekul.
16. Menyimpan hasil analisis dalam CSV.
17. Menulis interpretasi spektrum IR secara ilmiah dan kritis.

Indikator tersebut menunjukkan bahwa Praktikum 6 menuntut integrasi antara teori vibrasi, komputasi, visualisasi spektrum, dan interpretasi kimia.

11. Sikap Ilmiah yang Diharapkan

Praktikum 6 juga bertujuan membentuk sikap ilmiah. Mahasiswa harus teliti dalam memeriksa apakah optimasi geometri selesai normal. Mereka harus memastikan bahwa frekuensi yang diperoleh tidak mengandung frekuensi imajiner jika tujuan perhitungan adalah struktur minimum. Mereka harus mencatat metode, basis set, faktor skala, dan sumber data frekuensi.

Mahasiswa juga harus berhati-hati dalam menafsirkan puncak IR. Puncak tidak boleh diidentifikasi hanya berdasarkan satu angka tanpa memperhatikan mode normal. Misalnya, puncak pada daerah C=O harus diperiksa apakah mode tersebut benar-benar dominan regangan karbonil. Puncak O–H harus dibedakan antara O–H bebas dan O–H yang dipengaruhi ikatan hidrogen jika konteksnya melibatkan lingkungan molekul. Dalam praktikum dasar, pembahasan dapat disederhanakan, tetapi kehati-hatian ilmiah tetap harus dibangun.

Sikap ilmiah yang ditekankan adalah:

1. Memvalidasi geometri sebelum membaca frekuensi.
2. Memeriksa ada tidaknya frekuensi imajiner.
3. Membedakan frekuensi komputasi dan eksperimen.
4. Menerapkan faktor skala secara bertanggung jawab.
5. Menafsirkan puncak berdasarkan mode normal.
6. Tidak menghafal daerah IR secara kaku.
7. Menyebut keterbatasan metode komputasi.
8. Menyimpan output dan CSV untuk reproduibilitas.

Dengan sikap tersebut, mahasiswa tidak hanya menjadi pengguna software, tetapi menjadi pembaca kritis terhadap hasil spektrum komputasi.

12. Implikasi Pembelajaran Praktikum 6

Praktikum 6 memiliki implikasi pembelajaran yang luas. Pertama, mahasiswa belajar bahwa molekul bersifat dinamis. Struktur teroptimasi bukan akhir dari analisis, karena atom-atom tetap bergetar di sekitar posisi setimbang.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa spektrum IR merupakan representasi gerak vibrasi molekul. Puncak IR bukan sekadar garis pada grafik, tetapi hasil dari mode normal yang memiliki energi dan intensitas tertentu.

Ketiga, mahasiswa belajar bahwa perhitungan frekuensi dapat memvalidasi struktur. Frekuensi imajiner menjadi indikator penting untuk memeriksa apakah struktur benar-benar minimum.

Keempat, mahasiswa belajar bahwa data komputasi perlu dikoreksi dan ditafsirkan. Faktor skala menunjukkan bahwa model harmonik dan metode komputasi memiliki keterbatasan.

Kelima, mahasiswa belajar menghubungkan teori dan eksperimen. Spektrum IR komputasi dapat dibandingkan dengan spektrum eksperimen, sehingga mahasiswa memahami peran kimia komputasi sebagai alat prediksi dan interpretasi.

Dengan demikian, Praktikum 6 menjadi jembatan antara kimia kuantum, spektroskopi, dan analisis gugus fungsi.

13. Transisi ke Dasar Teori

Subbab 9.1 telah menjelaskan tujuan Praktikum 6, yaitu menghitung frekuensi vibrasi, mengenali mode normal, dan menafsirkan spektrum IR hasil komputasi. Tujuan tersebut mencakup pemahaman tentang frekuensi vibrasi, mode normal, intensitas IR, frekuensi imajiner, faktor skala, identifikasi puncak utama, serta hubungan antara spektrum dan jenis ikatan.

Subbab berikutnya akan membahas dasar teori. Pada subbab 9.2, pembahasan akan diarahkan pada mode normal, frekuensi harmonik, intensitas IR, frekuensi imajiner, dan hubungan kekuatan ikatan dengan frekuensi vibrasi. Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap mempelajari teori vibrasi molekul secara sistematis dan menghubungkannya dengan output komputasi.

9.2 Dasar Teori

Dasar teori Praktikum 6 membahas **mode normal, frekuensi harmonik, intensitas IR, frekuensi imajiner, dan hubungan kekuatan ikatan dengan frekuensi vibrasi**. Kelima konsep ini menjadi fondasi untuk memahami spektrum IR komputasi. Tanpa dasar teori tersebut, mahasiswa hanya akan melihat daftar angka frekuensi dan intensitas sebagai output software. Dengan dasar teori yang benar, mahasiswa dapat menafsirkan angka-angka tersebut sebagai informasi tentang gerak atom, kekuatan ikatan, gugus fungsi, kestabilan geometri, dan aktivitas spektroskopi molekul.

Spektrum IR muncul karena molekul menyerap radiasi inframerah pada frekuensi tertentu yang sesuai dengan energi vibrasi molekul. Namun, tidak semua vibrasi molekul akan muncul sebagai puncak IR. Suatu mode vibrasi akan aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol molekul. Oleh karena itu, pembahasan IR tidak dapat dilepaskan dari konsep momen dipol yang telah dibahas pada Bab 8. Bedanya, Bab 8 menekankan momen dipol permanen pada keadaan setimbang, sedangkan Bab 9 menekankan **perubahan momen dipol selama vibrasi**.

Dalam kimia komputasi, frekuensi vibrasi biasanya dihitung setelah optimasi geometri. Struktur molekul dioptimasi terlebih dahulu untuk mencari titik minimum energi. Setelah itu, dilakukan perhitungan frekuensi untuk menentukan apakah struktur tersebut benar-benar minimum dan untuk memperoleh mode vibrasi serta intensitas IR. Jika semua frekuensi bernilai nyata, struktur biasanya merupakan minimum lokal. Jika terdapat frekuensi imajiner, struktur perlu dianalisis ulang karena kemungkinan belum mencapai minimum atau berada pada titik sadel.

Secara historis, teori vibrasi molekul berkembang dari model osilator harmonik dalam mekanika klasik, kemudian diperluas melalui mekanika kuantum dan spektroskopi molekul. Karya-karya seperti Wilson, Decius, dan Cross tentang vibrasi molekul, Herzberg tentang spektrum molekul, Harris dan Bertolucci tentang simetri dan spektroskopi, serta Atkins, Friedman, Levine, McQuarrie, dan Hollas dalam kimia fisik dan spektroskopi modern, menempatkan vibrasi molekul sebagai salah satu jembatan penting antara struktur molekul dan data eksperimen. Dalam kimia komputasi, teori ini diterapkan melalui optimasi geometri, matriks Hessian, mode normal, frekuensi harmonik, intensitas IR, dan simulasi spektrum.

1. Vibrasi Molekul sebagai Gerak di Sekitar Posisi Kesetimbangan

Molekul tidak diam. Atom-atom dalam molekul selalu bergerak di sekitar posisi kesetimbangannya. Gerakan ini dapat berupa regangan ikatan, pembengkokan sudut, puntiran, goyangan, atau gerakan kolektif yang melibatkan banyak atom. Dalam pendekatan dasar, vibrasi molekul dipahami sebagai gerak atom-atom di sekitar geometri minimum.

Jika suatu ikatan dianggap seperti pegas, maka atom-atom yang terikat dapat bergetar seperti massa yang dihubungkan oleh pegas. Model sederhana ini dikenal sebagai model **osilator harmonik**. Walaupun molekul nyata lebih kompleks daripada pegas sederhana, model ini sangat berguna untuk memahami hubungan antara kekuatan ikatan, massa atom, dan frekuensi vibrasi.

Dalam model sederhana dua atom, frekuensi vibrasi bergantung pada konstanta gaya ikatan dan massa tereduksi:

$$\nu \propto \sqrt{k / \mu}$$

dengan:

ν = frekuensi vibrasi
 k = konstanta gaya ikatan
 μ = massa tereduksi

Hubungan ini memberi dua prinsip penting:

1. Jika ikatan lebih kuat, nilai k lebih besar, sehingga frekuensi vibrasi lebih tinggi.
2. Jika atom yang bergetar lebih berat, massa tereduksi lebih besar, sehingga frekuensi vibrasi lebih rendah.

Secara konseptual:

ikatan kuat
 → frekuensi tinggi

atom ringan
 → frekuensi tinggi

ikatan lemah
→ frekuensi rendah

atom berat
→ frekuensi rendah

Prinsip ini menjelaskan mengapa vibrasi O–H dan N–H sering muncul pada frekuensi tinggi, sedangkan vibrasi yang melibatkan atom lebih berat atau mode pembengkokan sering muncul pada frekuensi lebih rendah. Prinsip ini juga menjelaskan mengapa ikatan rangkap C=O muncul pada frekuensi lebih tinggi daripada banyak ikatan tunggal C–O.

2. Bilangan Gelombang dalam Spektroskopi IR

Dalam spektroskopi IR, posisi puncak biasanya dinyatakan dalam **bilangan gelombang** dengan satuan cm^{-1} , bukan dalam hertz. Bilangan gelombang menunjukkan jumlah gelombang per sentimeter dan berbanding lurus dengan energi vibrasi.

Secara umum:

bilangan gelombang tinggi
→ energi vibrasi tinggi

bilangan gelombang rendah
→ energi vibrasi rendah

Spektrum IR biasanya dibaca pada daerah sekitar:

4000–400 cm^{-1}

Daerah tinggi, misalnya 3200–3700 cm^{-1} , sering berkaitan dengan regangan O–H atau N–H. Daerah sekitar 2800–3100 cm^{-1} sering berkaitan dengan regangan C–H. Daerah sekitar 1650–1800 cm^{-1} sering berkaitan dengan regangan C=O. Daerah 1000–1300 cm^{-1} sering berkaitan dengan regangan C–O. Daerah di bawah 1500 cm^{-1} sering disebut daerah sidik jari atau **fingerprint region**, karena banyak mode vibrasi kompleks muncul di sana.

Tabel panduan umum:

Daerah Bilangan Gelombang	Contoh Vibrasi
3200–3700 cm^{-1}	Regangan O–H dan N–H
2800–3100 cm^{-1}	Regangan C–H
2100–2300 cm^{-1}	Regangan ikatan rangkap tiga tertentu atau mode linear tertentu
1650–1800 cm^{-1}	Regangan C=O
1000–1300 cm^{-1}	Regangan C–O
< 1500 cm^{-1}	Berbagai mode deformasi dan fingerprint region

Rentang tersebut bersifat panduan, bukan hukum mutlak. Posisi puncak dapat berubah karena konjugasi, ikatan hidrogen, substituen, muatan, fase, pelarut, metode komputasi, dan faktor skala.

3. Mode Normal Molekul

Mode normal adalah pola gerak kolektif atom-atom dalam molekul yang terjadi pada frekuensi tertentu. Dalam satu mode normal, atom-atom bergerak secara terkoordinasi. Mode normal bukan sekadar “satu ikatan bergetar sendiri”, walaupun dalam interpretasi sederhana suatu mode sering didominasi oleh regangan atau pembengkokan ikatan tertentu.

Misalnya, pada H₂O terdapat tiga mode vibrasi utama:

1. Regangan simetris O–H.
2. Regangan antisimetri O–H.
3. Pembengkokan H–O–H.

Pada CO₂, terdapat mode regangan simetris, regangan antisimetri, dan pembengkokan. Karena CO₂ linear, mode pembengkokannya bersifat degenerat, yaitu dua mode pembengkokan memiliki energi yang sama tetapi terjadi pada arah yang berbeda.

Jumlah mode normal bergantung pada jumlah atom dan bentuk molekul. Untuk molekul nonlinier:

$$\text{jumlah mode vibrasi} = 3N - 6$$

Untuk molekul linear:

$$\text{jumlah mode vibrasi} = 3N - 5$$

dengan N adalah jumlah atom.

Mengapa berbeda? Setiap atom memiliki tiga derajat kebebasan gerak dalam ruang, sehingga total derajat kebebasan adalah $3N$. Dari jumlah tersebut, gerak translasi dan rotasi molekul harus dikurangi. Molekul nonlinier memiliki tiga translasi dan tiga rotasi, sehingga dikurangi 6. Molekul linear memiliki tiga translasi dan dua rotasi, sehingga dikurangi 5.

Contoh:

Molekul	Jumlah Atom	Linear/Nonlinier	Jumlah Mode Vibrasi
H ₂ O	3	Nonlinier	3
CO ₂	3	Linear	4
NH ₃	4	Nonlinier	6
Formaldehida	4	Nonlinier	6
Etanol	9	Nonlinier	21
Aseton	10	Nonlinier	24

Jumlah mode normal ini penting karena mahasiswa dapat memeriksa apakah output perhitungan frekuensi masuk akal. Jika jumlah frekuensi tidak sesuai, kemungkinan ada kesalahan dalam membaca output atau struktur molekul.

4. Jenis-Jenis Gerak Vibrasi

Gerak vibrasi molekul dapat diklasifikasikan secara sederhana menjadi dua kelompok besar: **regangan** dan **pembengkokan**.

Regangan atau stretching adalah perubahan panjang ikatan. Regangan dapat berupa:

1. Regangan simetris.
2. Regangan antisimetri.

Pembengkokan atau bending adalah perubahan sudut ikatan. Pembengkokan dapat berupa scissoring, rocking, wagging, atau twisting, tergantung pola gerak atom.

Secara umum, regangan ikatan sering muncul pada frekuensi lebih tinggi daripada pembengkokan karena meregangkan ikatan biasanya memerlukan energi lebih besar daripada mengubah sudut ikatan.

Ringkasan:

Jenis Vibrasi	Makna	Kecenderungan Frekuensi
Regangan	Perubahan panjang ikatan	Relatif lebih tinggi
Pembengkokan	Perubahan sudut ikatan	Relatif lebih rendah
Puntiran	Perubahan orientasi di sekitar ikatan	Sering lebih rendah
Mode kolektif	Banyak atom bergerak bersama	Bergantung struktur molekul

Contoh pada H_2O :

regangan O-H
→ frekuensi tinggi

pembengkokan H-O-H
→ frekuensi lebih rendah

Contoh pada formaldehida dan aseton:

regangan C=O
→ puncak kuat pada daerah karbonil

regangan C-H
→ daerah lebih tinggi daripada banyak mode deformasi

mode deformasi CH

→ daerah fingerprint

Mahasiswa harus berhati-hati karena pada molekul besar, satu mode normal dapat melibatkan banyak gerakan sekaligus. Karena itu, penugasan puncak sebaiknya dilakukan dengan melihat animasi mode normal, bukan hanya berdasarkan angka frekuensi.

5. Frekuensi Harmonik

Dalam perhitungan kimia komputasi dasar, frekuensi vibrasi biasanya dihitung dalam pendekatan **harmonik**. Pendekatan harmonik menganggap bahwa permukaan energi potensial di sekitar titik minimum dapat didekati dengan bentuk parabola. Artinya, jika atom sedikit bergeser dari posisi setimbang, energi meningkat secara kuadratik.

Secara sederhana:

energi potensial harmonik $\propto$ perpindahan²

Untuk osilator harmonik satu dimensi:

$$V(x) = 1/2 kx^2$$

dengan:

$V(x)$ = energi potensial

k = konstanta gaya

x = perpindahan dari posisi setimbang

Model harmonik sangat berguna karena sederhana dan dapat dihitung secara sistematis. Namun, molekul nyata tidak sepenuhnya harmonik. Jika ikatan diregangkan terlalu jauh, energi tidak lagi mengikuti parabola sempurna. Molekul nyata menunjukkan **anharmonisitas**. Inilah salah satu alasan frekuensi komputasi harmonik sering berbeda dari frekuensi eksperimen.

Dalam perhitungan komputasi, frekuensi harmonik diperoleh dari kelengkungan permukaan energi potensial di sekitar geometri teroptimasi. Kelengkungan ini dinyatakan melalui turunan kedua energi terhadap koordinat atom, yang tersusun dalam matriks Hessian.

Secara konseptual:

geometri teroptimasi

→ hitung Hessian

→ massa-bobot Hessian

→ mode normal

→ frekuensi harmonik

Mahasiswa tidak harus menurunkan seluruh persamaan Hessian, tetapi harus memahami bahwa frekuensi komputasi bukan angka acak. Frekuensi berasal dari bentuk permukaan energi potensial di sekitar struktur minimum.

6. Matriks Hessian dan Makna Kelengkungan Energi

Matriks Hessian adalah matriks turunan kedua energi terhadap koordinat atom. Dalam konteks vibrasi, Hessian menunjukkan bagaimana energi berubah ketika atom-atom digeser sedikit dari posisi setimbang. Jika energi naik tajam ketika ikatan diregangkan, maka kelengkungan besar dan frekuensi vibrasinya tinggi. Jika energi naik perlahan, maka kelengkungan kecil dan frekuensi vibrasinya lebih rendah.

Secara konseptual:

kelengkungan energi besar

→ ikatan atau mode kuat

→ frekuensi tinggi

kelengkungan energi kecil

→ mode lebih lemah atau lebih lunak

→ frekuensi rendah

Dalam perhitungan frekuensi, Hessian biasanya dibobot oleh massa atom. Hal ini penting karena atom yang lebih berat bergerak lebih lambat untuk gaya pemulih yang sama. Setelah proses pembobotan massa dan diagonalization, diperoleh frekuensi dan mode normal.

Hubungan ini menjelaskan mengapa vibrasi O–H tinggi. Ikatan O–H relatif kuat, dan atom H sangat ringan. Kombinasi ikatan kuat dan massa ringan menghasilkan frekuensi tinggi. Sebaliknya, vibrasi yang melibatkan atom lebih berat atau ikatan lebih lemah muncul pada frekuensi lebih rendah.

7. Intensitas IR

Frekuensi menunjukkan posisi puncak, sedangkan **intensitas IR** menunjukkan kuat lemahnya serapan. Dalam teori IR, suatu mode vibrasi aktif jika vibrasi tersebut menyebabkan perubahan momen dipol molekul.

Secara sederhana:

mode IR aktif

→ momen dipol berubah selama vibrasi

Secara konseptual, intensitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol terhadap koordinat normal:

$$\text{intensitas IR} \propto (\partial\mu/\partial Q)^2$$

dengan:

μ = momen dipol

Q = koordinat normal vibrasi

Jika suatu mode vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol yang besar, intensitas IR-nya cenderung kuat. Jika perubahan momen dipol kecil, intensitasnya lemah. Jika tidak ada perubahan momen dipol, mode tersebut tidak aktif IR.

Contoh penting adalah regangan C=O. Gugus karbonil memiliki ikatan yang sangat polar. Ketika ikatan C=O bergetar, perubahan momen dipol biasanya signifikan. Karena itu, puncak C=O sering muncul kuat pada spektrum IR.

Sebaliknya, regangan simetris pada molekul sangat simetris dapat tidak aktif IR jika tidak menyebabkan perubahan momen dipol. CO₂ menjadi contoh penting. Regangan simetris CO₂ tidak aktif IR karena tidak mengubah momen dipol molekul, sedangkan regangan antisimetri dan pembengkokan dapat aktif IR karena menghasilkan perubahan momen dipol selama vibrasi.

8. Perbedaan Momen Dipol Permanen dan Perubahan Momen Dipol

Mahasiswa sering keliru memahami hubungan antara polaritas molekul dan aktivitas IR. Molekul polar biasanya memiliki mode IR aktif, tetapi molekul nonpolar juga dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasinya menyebabkan perubahan momen dipol. Oleh karena itu, perlu dibedakan antara:

1. **Momen dipol permanen**
2. **Perubahan momen dipol selama vibrasi**

Momen dipol permanen menggambarkan polaritas molekul pada keadaan setimbang. Perubahan momen dipol selama vibrasi menentukan aktivitas IR suatu mode.

Tabel perbandingan:

Konsep	Makna	Relevansi
Momen dipol permanen	Dipol pada geometri setimbang	Menentukan polaritas molekul
Perubahan momen dipol	Perubahan dipol saat atom bergetar	Menentukan aktivitas IR

CO₂ tidak memiliki momen dipol permanen, tetapi beberapa mode vibrasinya aktif IR. Ini menunjukkan bahwa molekul nonpolar permanen tidak otomatis tidak aktif IR. Yang menentukan aktivitas IR adalah perubahan momen dipol selama vibrasi.

Pernyataan yang benar:

CO₂ nonpolar pada keadaan setimbang, tetapi mode vibrasi tertentu dapat aktif IR karena selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol sesaat.

Pernyataan yang salah:

CO₂ nonpolar sehingga tidak memiliki spektrum IR.

Kesalahan ini harus dihindari dalam Praktikum 6.

9. Frekuensi Imajiner

Frekuensi imajiner adalah frekuensi yang muncul ketika matriks Hessian memiliki kelengkungan negatif pada arah koordinat tertentu. Dalam banyak output software, frekuensi imajiner ditampilkan sebagai angka negatif, walaupun secara matematis istilah yang lebih tepat adalah frekuensi imajiner karena berasal dari akar kuadrat nilai eigen negatif.

Makna frekuensi imajiner sangat penting. Jika suatu struktur memiliki frekuensi imajiner, maka struktur tersebut bukan minimum energi sejati pada semua arah. Ada arah tertentu pada permukaan energi potensial yang menurunkan energi jika molekul bergerak sepanjang arah tersebut.

Secara sederhana:

frekuensi nyata

- kelengkungan energi positif
- arah vibrasi stabil

frekuensi imajiner

- kelengkungan energi negatif
- struktur belum minimum pada arah tersebut

Dalam perhitungan molekul stabil, seperti H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton pada struktur minimum, seharusnya tidak ada frekuensi imajiner. Jika ada frekuensi imajiner, mahasiswa harus memeriksa:

1. Apakah optimasi geometri telah konvergen.
2. Apakah struktur awal benar.
3. Apakah terdapat geometri yang tidak wajar.
4. Apakah mode imajiner menunjukkan gerakan menuju struktur lain.
5. Apakah perhitungan frekuensi dilakukan pada struktur yang sama dengan hasil optimasi akhir.
6. Apakah metode dan basis set sesuai.

Dalam kimia komputasi reaksi, satu frekuensi imajiner sering digunakan sebagai indikator keadaan transisi. Namun, dalam Praktikum 6, fokusnya adalah molekul stabil. Karena itu, frekuensi imajiner dianggap sebagai tanda bahwa struktur perlu diperbaiki atau optimasi harus diulang.

10. Frekuensi Imajiner dan Validasi Geometri

Perhitungan frekuensi memiliki dua fungsi utama:

1. Menghasilkan spektrum vibrasi.
2. Memvalidasi apakah geometri merupakan minimum.

Jika semua frekuensi nyata, struktur dapat dianggap minimum lokal. Jika terdapat frekuensi imajiner, struktur belum dapat dianggap minimum. Oleh karena itu, sebelum menafsirkan spektrum IR, mahasiswa harus memeriksa ada tidaknya frekuensi imajiner.

Alur validasi:

```
optimasi geometri selesai
→ jalankan perhitungan frekuensi
→ periksa frekuensi imajiner
→ jika tidak ada, lanjut analisis IR
→ jika ada, periksa ulang geometri
```

Contoh laporan yang baik:

Perhitungan frekuensi tidak menunjukkan adanya frekuensi imajiner. Oleh karena itu, struktur hasil optimasi dapat dianggap sebagai minimum lokal pada tingkat teori yang digunakan.

Jika ada frekuensi imajiner:

Output menunjukkan satu frekuensi imajiner. Hal ini mengindikasikan bahwa struktur belum merupakan minimum lokal. Oleh karena itu, interpretasi spektrum IR harus ditunda sampai optimasi geometri diperbaiki.

Pernyataan seperti ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami fungsi perhitungan frekuensi sebagai alat validasi, bukan hanya sebagai generator spektrum.

11. Hubungan Kekuatan Ikatan dengan Frekuensi Vibrasi

Frekuensi vibrasi sangat dipengaruhi oleh kekuatan ikatan. Ikatan yang lebih kuat memiliki konstanta gaya lebih besar, sehingga frekuensi vibrasinya lebih tinggi. Ikatan rangkap umumnya memiliki frekuensi regangan lebih tinggi daripada ikatan tunggal sejenis karena ikatan rangkap lebih kuat dan lebih kaku.

Contoh umum:

C=O

- ikatan kuat dan polar
- frekuensi regangan relatif tinggi
- puncak IR sering kuat

Sebaliknya:

- C-O
- ikatan tunggal
- frekuensi regangan lebih rendah daripada C=O

Namun, kekuatan ikatan bukan satu-satunya faktor. Massa atom juga berpengaruh. Ikatan O-H dan N-H muncul pada frekuensi tinggi karena melibatkan atom H yang ringan. Ikatan C-H juga muncul pada daerah tinggi, meskipun posisi pastinya berbeda dari O-H dan N-H.

Tabel ringkas:

Ikatan atau Mode	Kecenderungan Frekuensi	Alasan
O-H stretch	Tinggi	H ringan, ikatan relatif kuat
N-H stretch	Tinggi	H ringan, ikatan cukup kuat
C-H stretch	Tinggi	H ringan
C=O stretch	Menengah-tinggi dan kuat	Ikatan rangkap kuat dan polar
C-O stretch	Menengah	Ikatan tunggal polar
Bending	Lebih rendah	Perubahan sudut biasanya lebih mudah

Prinsip ini menjadi dasar identifikasi puncak utama pada spektrum IR.

12. Hubungan Massa Atom dengan Frekuensi Vibrasi

Selain kekuatan ikatan, massa atom sangat memengaruhi frekuensi vibrasi. Dalam model osilator harmonik, frekuensi berbanding terbalik dengan akar massa tereduksi. Jika massa atom lebih besar, frekuensi vibrasi cenderung lebih rendah.

Massa tereduksi untuk dua atom dapat ditulis:

$$\mu = (m_1 m_2) / (m_1 + m_2)$$

Semakin besar massa tereduksi, semakin rendah frekuensi vibrasi untuk konstanta gaya yang sama. Inilah sebabnya penggantian isotop dapat menggeser frekuensi vibrasi. Misalnya, ikatan O-D memiliki frekuensi lebih rendah daripada O-H karena deuterium lebih berat daripada hidrogen.

Meskipun Praktikum 6 tidak secara khusus membahas isotop, prinsip massa ini penting untuk memahami mengapa ikatan yang melibatkan H sering muncul pada daerah frekuensi tinggi.

Secara konseptual:

atom ringan
 → massa tereduksi kecil
 → frekuensi tinggi

atom berat
 → massa tereduksi besar
 → frekuensi rendah

Prinsip ini juga membantu mahasiswa memahami bahwa frekuensi IR bukan hanya “daftar gugus fungsi”, tetapi hasil dari dinamika mekanik molekul.

13. Gugus Fungsi dan Daerah IR

Dalam interpretasi praktikum, mahasiswa perlu menghubungkan frekuensi vibrasi dengan gugus fungsi. Molekul model Praktikum 6 dipilih agar mahasiswa dapat mengenali beberapa jenis ikatan penting.

a. O–H

O–H biasanya muncul pada daerah frekuensi tinggi. Pada etanol, vibrasi O–H menjadi ciri penting. Dalam spektrum eksperimen, O–H dapat melebar karena ikatan hidrogen. Dalam spektrum komputasi fase gas, puncak O–H dapat lebih tajam karena model sering tidak memasukkan asosiasi antarmolekul secara eksplisit.

b. N–H

N–H muncul pada daerah tinggi, tetapi biasanya berbeda dari O–H. NH_3 menjadi molekul model untuk melihat mode N–H stretching dan bending.

c. C–H

C–H muncul sekitar daerah $2800\text{--}3100\text{ cm}^{-1}$, bergantung jenis C–H. Etanol, formaldehida, dan aseton memiliki mode C–H yang dapat diamati.

d. C=O

C=O sering muncul sebagai puncak kuat pada daerah sekitar $1650\text{--}1800\text{ cm}^{-1}$. Formaldehida dan aseton menjadi molekul model utama untuk melihat puncak karbonil. Intensitas C=O sering kuat karena regangan karbonil menyebabkan perubahan momen dipol yang signifikan.

e. C–O

C–O muncul pada daerah lebih rendah daripada C=O. Etanol menjadi molekul model untuk melihat kontribusi C–O.

Tabel ringkas:

Molekul Model	Gugus atau Ikatan Penting
H ₂ O	O–H, bending H–O–H
CO ₂	C=O linear, stretching dan bending
NH ₃	N–H, bending H–N–H
Formaldehida	C=O, C–H
Etanol	O–H, C–H, C–O
Aseton	C=O, C–H

14. Faktor Skala Frekuensi Komputasi

Frekuensi vibrasi hasil komputasi sering lebih tinggi daripada frekuensi eksperimen karena pendekatan harmonik dan keterbatasan metode. Oleh karena itu, frekuensi komputasi sering dikalikan dengan **faktor skala**.

Rumus:

frekuensi terkoreksi = faktor skala × frekuensi komputasi

Contoh:

frekuensi komputasi = 1800 cm⁻¹

faktor skala = 0,96

frekuensi terkoreksi = 1728 cm⁻¹

Faktor skala tidak boleh dipilih sembarangan. Dalam praktik ilmiah, faktor skala biasanya ditentukan berdasarkan metode dan basis set tertentu serta dibandingkan dengan data eksperimen. Dalam praktikum dasar, dosen dapat memberikan faktor skala yang digunakan secara seragam agar mahasiswa memahami prinsip koreksi.

Faktor skala perlu diterapkan karena:

1. Model harmonik mengabaikan anharmonisitas.
2. Metode komputasi memiliki galat sistematis.
3. Basis set terbatas.
4. Lingkungan eksperimen tidak selalu dimodelkan.
5. Interaksi antarmolekul dapat menggeser frekuensi.

Dalam laporan, mahasiswa harus menyebutkan faktor skala yang digunakan:

Frekuensi vibrasi dikoreksi menggunakan faktor skala 0,96 sebelum dibuat spektrum IR simulasi.

Jika faktor skala tidak disebutkan, spektrum terkoreksi tidak dapat dievaluasi.

15. Spektrum IR Simulasi

Output perhitungan frekuensi biasanya berupa daftar frekuensi dan intensitas, bukan spektrum halus seperti hasil instrumen. Untuk membuat spektrum IR simulasi, daftar puncak diskrit dapat diperluas menjadi kurva menggunakan fungsi pelebaran, misalnya Gaussian atau Lorentzian. Dalam Praktikum 6, Python digunakan untuk membuat spektrum IR simulasi dari daftar frekuensi dan intensitas.

Secara konseptual:

```
daftar frekuensi + intensitas
→ fungsi pelebaran puncak
→ spektrum IR simulasi
```

Spektrum simulasi memudahkan mahasiswa melihat pola puncak secara visual. Puncak yang intensitasnya tinggi akan tampak kuat. Puncak yang berdekatan dapat saling tumpang tindih. Dengan spektrum simulasi, mahasiswa dapat membandingkan dua molekul secara lebih mudah.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa spektrum simulasi bergantung pada parameter pelebaran. Jika pelebaran terlalu besar, puncak dapat tampak menyatu. Jika pelebaran terlalu kecil, spektrum tampak terlalu tajam. Oleh karena itu, parameter simulasi harus dicatat.

16. Identifikasi Puncak Utama

Identifikasi puncak utama adalah bagian penting dalam analisis spektrum IR. Puncak utama biasanya dipilih berdasarkan intensitas yang besar atau relevansi gugus fungsi. Namun, puncak kuat tidak selalu satu-satunya puncak penting. Puncak khas gugus fungsi juga perlu diperhatikan meskipun intensitasnya tidak selalu paling besar.

Langkah identifikasi puncak utama:

1. Urutkan puncak berdasarkan intensitas.
2. Periksa frekuensi setelah faktor skala.
3. Cocokkan dengan daerah gugus fungsi.
4. Lihat animasi mode normal jika tersedia.
5. Tentukan jenis vibrasi dominan.
6. Catat puncak utama dalam tabel.

Format tabel:

Molekul	Frekuensi Terkoreksi (cm^{-1})	Intensitas	Penugasan Mode
Etanol	...	...	O–H stretch

Etanol	...	...	C–H stretch
Etanol	...	...	C–O stretch
Aseton	...	...	C=O stretch

Mahasiswa harus menghindari penugasan puncak hanya berdasarkan angka tanpa memeriksa mode normal. Pada molekul besar, mode dapat bercampur. Misalnya, suatu puncak dapat melibatkan gerak C–H dan deformasi rangka sekaligus.

17. Analisis Kritis terhadap Spektrum IR Komputasi

Spektrum IR komputasi sangat berguna, tetapi harus ditafsirkan secara kritis. Ada beberapa keterbatasan.

Pertama, banyak perhitungan menggunakan pendekatan harmonik. Molekul nyata bersifat anharmonik. Akibatnya, frekuensi komputasi perlu faktor skala.

Kedua, perhitungan sering dilakukan pada molekul tunggal dalam fase gas, sedangkan spektrum eksperimen dapat diperoleh dalam cairan, padatan, larutan, atau matriks. Lingkungan dapat menggeser frekuensi dan mengubah bentuk puncak.

Ketiga, ikatan hidrogen dapat menyebabkan puncak O–H melebar dan bergeser. Jika model komputasi hanya menggunakan satu molekul etanol bebas, hasilnya mungkin berbeda dari spektrum etanol cair.

Keempat, intensitas komputasi bergantung pada metode dan perubahan momen dipol yang dihitung. Intensitas relatif dapat berbeda dari spektrum eksperimen.

Kelima, penugasan mode normal pada molekul besar bisa kompleks karena satu mode melibatkan banyak atom.

Dengan demikian, mahasiswa harus menulis analisis secara hati-hati. Spektrum komputasi adalah model yang kuat, tetapi bukan salinan sempurna dari spektrum eksperimen.

18. Aplikasi Frekuensi Vibrasi dan Spektrum IR Komputasi

Perhitungan frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi memiliki banyak aplikasi.

Pertama, untuk **validasi struktur**. Tidak adanya frekuensi imajiner mendukung bahwa geometri merupakan minimum lokal.

Kedua, untuk **identifikasi gugus fungsi**. Puncak O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O dapat membantu mengenali struktur molekul.

Ketiga, untuk **membandingkan isomer**. Isomer yang berbeda dapat memiliki spektrum IR berbeda.

Keempat, untuk **membantu interpretasi eksperimen**. Spektrum komputasi dapat membantu menugaskan puncak eksperimen yang tumpang tindih.

Kelima, untuk **mempelajari efek substituen**. Substituen dapat menggeser frekuensi C=O, C–O, atau mode lainnya.

Keenam, untuk **studi reaksi**. Frekuensi imajiner dapat digunakan dalam analisis keadaan transisi, meskipun hal ini belum menjadi fokus Praktikum 6.

Ketujuh, untuk **pendidikan kimia**. Animasi mode normal membantu mahasiswa memahami bahwa spektrum IR berasal dari gerak atom nyata, bukan hanya grafik abstrak.

19. Sintesis Teori untuk Praktikum 6

Sintesis teori Praktikum 6 dapat diringkas sebagai berikut:

```
molekul teroptimasi
→ Hessian
→ mode normal
→ frekuensi harmonik
→ intensitas IR
→ spektrum simulasi
→ penugasan gugus fungsi
```

Jika struktur belum minimum, frekuensi imajiner dapat muncul. Jika frekuensi terlalu tinggi dibanding eksperimen, faktor skala dapat diterapkan. Jika intensitas IR kuat, biasanya mode tersebut menyebabkan perubahan momen dipol besar. Jika puncak muncul pada daerah khas, mahasiswa dapat menghubungkannya dengan jenis ikatan atau gugus fungsi.

Dengan sintesis ini, Praktikum 6 tidak sekadar menjadi latihan menjalankan software. Praktikum ini menjadi latihan membaca gerak molekul, menghubungkan teori osilator harmonik dengan output komputasi, dan menafsirkan spektrum sebagai informasi struktur.

20. Transisi ke Software yang Digunakan

Subbab 9.2 telah membahas dasar teori Praktikum 6, meliputi mode normal, frekuensi harmonik, intensitas IR, frekuensi imajiner, faktor skala, hubungan kekuatan ikatan dengan frekuensi vibrasi, serta interpretasi puncak IR. Pembahasan ini menjadi fondasi untuk menjalankan perhitungan frekuensi dan menafsirkan spektrum IR komputasi secara benar.

Subbab berikutnya akan membahas software yang digunakan dalam Praktikum 6, yaitu ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Avogadro, GaussView, Molden, dan Python. Software tersebut akan digunakan untuk membangun struktur, mengoptimasi geometri, menghitung frekuensi vibrasi, membaca intensitas IR, memvisualisasikan mode normal, membuat spektrum IR simulasi, menerapkan faktor skala, dan menyimpan hasil analisis.

9.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 6 dipilih untuk mendukung seluruh alur kerja perhitungan frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi, mulai dari **pembuatan struktur molekul, optimasi geometri, perhitungan frekuensi, pembacaan mode normal, visualisasi gerak vibrasi, penyusunan spektrum IR simulasi**, hingga **analisis puncak utama**. Dengan demikian, software dalam praktikum ini tidak boleh dipahami sebagai alat yang berdiri sendiri, tetapi sebagai bagian dari sistem kerja komputasi yang saling melengkapi.

Software yang digunakan dalam Praktikum 6 adalah:

1. **ChemCompute**
2. **GAMESS**
3. **ORCA**
4. **Gaussian**
5. **Avogadro**
6. **GaussView**
7. **Molden**
8. **Python**

Pemilihan software tersebut mencerminkan kebutuhan praktikum. ChemCompute digunakan sebagai jalur berbasis web agar mahasiswa dapat menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi tanpa instalasi lokal yang rumit. GAMESS, ORCA, dan Gaussian berperan sebagai paket kimia kuantum yang dapat menghitung energi, geometri, Hessian, frekuensi vibrasi, dan intensitas IR. Avogadro digunakan untuk membangun dan memeriksa struktur awal. GaussView dan Molden digunakan untuk membaca output serta memvisualisasikan mode vibrasi. Python digunakan untuk membuat spektrum IR simulasi, menerapkan faktor skala, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan spektrum dua molekul, dan menyimpan data dalam CSV.

Dalam literatur kimia komputasi, alur kerja seperti ini merupakan praktik umum. Perhitungan spektrum vibrasi biasanya tidak selesai hanya dengan satu tombol. Mahasiswa harus membangun struktur, mengoptimasi geometri, memeriksa frekuensi imajiner, membaca mode normal, menafsirkan intensitas IR, lalu menyajikan spektrum dalam bentuk yang dapat dianalisis. Buku-buku seperti karya Jensen, Cramer, Leach, Lewars, Levine, Atkins dan Friedman, serta Wilson, Decius, dan Cross menunjukkan bahwa perhitungan vibrasi molekul memerlukan hubungan erat antara teori, software, output numerik, dan interpretasi spektroskopi.

1. Prinsip Pemilihan Software pada Praktikum 6

Prinsip utama pemilihan software dalam Praktikum 6 adalah kesesuaian fungsi. Tidak semua software memiliki fungsi yang sama. Ada software yang kuat untuk membangun struktur, ada yang kuat untuk menghitung frekuensi, ada yang baik untuk membaca mode normal, dan ada yang unggul untuk analisis data.

Kebutuhan praktikum dapat diringkas sebagai berikut:

Kebutuhan Praktikum	Software yang Relevan
Membuat struktur molekul awal	Avogadro, GaussView
Mengoptimasi geometri	ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian
Menghitung frekuensi vibrasi	ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian
Membaca intensitas IR	ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian
Memvisualisasikan mode normal	GaussView, Molden, Avogadro
Memeriksa frekuensi imajiner	GAMESS, ORCA, Gaussian, ChemCompute
Membuat spektrum IR simulasi	Python
Menerapkan faktor skala	Python
Mengidentifikasi puncak utama	Python dan analisis manual
Menyimpan hasil CSV	Python

Tabel tersebut menunjukkan bahwa software tidak boleh diperlakukan sebagai pengganti teori. Software hanya menghasilkan data. Interpretasi tetap memerlukan pemahaman kimia. Misalnya, Gaussian atau ORCA dapat menampilkan frekuensi dan intensitas IR, tetapi mahasiswa tetap harus menjelaskan mengapa puncak C=O kuat, mengapa O–H muncul pada frekuensi tinggi, dan mengapa frekuensi imajiner menandakan struktur belum minimum.

Alur umum penggunaan software dalam Praktikum 6 adalah:

Avogadro atau GaussView
→ membuat struktur awal

ChemCompute, GAMESS, ORCA, atau Gaussian
→ optimasi geometri dan perhitungan frekuensi

GaussView atau Molden
→ visualisasi mode normal

Python
→ spektrum IR simulasi, faktor skala, puncak utama, CSV

Dengan alur ini, mahasiswa belajar bahwa praktikum kimia komputasi adalah proses bertahap, bukan sekadar menjalankan satu program.

2. ChemCompute sebagai Jalur Berbasis Web

ChemCompute digunakan sebagai jalur praktis untuk menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi melalui platform web. Dalam Praktikum 6, ChemCompute memudahkan mahasiswa yang belum memiliki instalasi lokal GAMESS, ORCA, atau Gaussian. Mahasiswa dapat membangun atau mengunggah struktur molekul, memilih paket komputasi yang tersedia, menjalankan optimasi, lalu melakukan perhitungan frekuensi.

Peran ChemCompute dalam Praktikum 6 meliputi:

1. Menyediakan akses perhitungan berbasis web.
2. Memudahkan mahasiswa pemula menjalankan job frekuensi.
3. Mengurangi hambatan instalasi software lokal.
4. Menghasilkan output frekuensi vibrasi.
5. Menyediakan intensitas IR jika paket komputasi mendukung.
6. Memungkinkan mahasiswa mengunduh output untuk dianalisis.
7. Menjadi jalur awal sebelum mahasiswa menggunakan software lokal.

Namun, ChemCompute harus dipahami sebagai **platform**, bukan sebagai metode kimia kuantum. Jika mahasiswa menulis “frekuensi dihitung dengan ChemCompute”, pernyataan tersebut masih belum lengkap. ChemCompute hanya menyediakan antarmuka dan akses. Metode perhitungannya tetap harus disebutkan.

Pernyataan yang lebih tepat adalah:

Optimasi geometri dan perhitungan frekuensi dilakukan melalui ChemCompute menggunakan paket komputasi yang tersedia. Metode, basis set, muatan, multiplicity, status optimasi, frekuensi vibrasi, dan intensitas IR dicatat berdasarkan output.

Dalam laporan, mahasiswa harus mencatat:

Informasi	Keterangan
Platform	ChemCompute
Paket komputasi	GAMESS atau paket lain yang tersedia
Metode	HF, DFT, atau semiempiris
Fungsional	Jika menggunakan DFT
Basis set	Misalnya STO-3G, 6-31G(d), atau basis lain
Jenis job	Optimasi geometri dan frekuensi
Molekul	H ₂ O, CO ₂ , NH ₃ , formaldehida, etanol, aseton
Output	Frekuensi, intensitas IR, frekuensi imajiner jika ada

ChemCompute sangat relevan untuk kelas besar karena membuat praktikum lebih mudah diakses. Namun, kemudahan ini membawa risiko “kotak hitam”. Mahasiswa dapat tergoda hanya mengambil daftar frekuensi tanpa memeriksa apakah optimasi selesai normal atau apakah terdapat frekuensi imajiner. Oleh karena itu, penggunaan ChemCompute harus disertai disiplin membaca output.

3. GAMESS sebagai Paket Kimia Kuantum

GAMESS merupakan salah satu paket kimia kuantum yang dapat digunakan untuk perhitungan energi, optimasi geometri, dan frekuensi vibrasi. Dalam Praktikum 6, GAMESS dapat digunakan secara langsung atau melalui platform seperti ChemCompute. GAMESS memiliki sejarah panjang dalam kimia komputasi dan sering digunakan dalam pendidikan karena menyediakan berbagai metode perhitungan struktur elektronik.

Peran GAMESS dalam Praktikum 6 meliputi:

1. Mengoptimasi geometri molekul.
2. Menghitung frekuensi vibrasi.
3. Menghasilkan mode normal.
4. Menghasilkan intensitas IR.
5. Memberikan output yang dapat dianalisis lebih lanjut.
6. Menjadi contoh paket komputasi yang kuat untuk pembelajaran.

Dalam konteks perhitungan vibrasi, GAMESS menghitung turunan kedua energi terhadap koordinat atom atau informasi yang setara untuk memperoleh frekuensi. Output GAMESS dapat memuat daftar frekuensi, intensitas IR, dan informasi mode normal. Data ini kemudian dapat diambil untuk membuat tabel dan spektrum simulasi.

Kelebihan GAMESS adalah kemampuannya menyediakan banyak metode dan fleksibilitas. Namun, mahasiswa perlu belajar membaca file input dan output dengan cermat. Output frekuensi sering panjang dan memerlukan perhatian khusus. Mahasiswa harus mencari bagian yang memuat frekuensi, intensitas, dan mode normal. Jika terdapat frekuensi negatif atau imajiner, struktur harus dievaluasi ulang.

Dalam laporan praktikum, mahasiswa harus menulis dengan jelas jika menggunakan GAMESS:

Perhitungan frekuensi dilakukan menggunakan GAMESS setelah optimasi geometri. Data frekuensi vibrasi dan intensitas IR diambil dari bagian output frekuensi. Struktur dianggap valid jika tidak terdapat frekuensi imajiner.

GAMESS juga memberi mahasiswa pengalaman membaca output komputasi yang lebih teknis. Pengalaman ini penting karena kimia komputasi tidak hanya bergantung pada antarmuka visual, tetapi juga pada kemampuan memahami output teks.

4. ORCA untuk Optimasi dan Frekuensi Vibrasi

ORCA merupakan paket kimia kuantum yang banyak digunakan untuk perhitungan struktur elektronik, termasuk optimasi geometri, frekuensi vibrasi, spektrum, sifat elektronik, dan berbagai

metode DFT. Dalam Praktikum 6, ORCA dapat digunakan untuk menjalankan job optimasi-frekuensi pada molekul model seperti H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton.

Peran ORCA dalam Praktikum 6:

1. Mengoptimasi struktur molekul.
2. Menghitung frekuensi harmonik.
3. Menghasilkan intensitas IR.
4. Menampilkan mode vibrasi.
5. Memeriksa ada tidaknya frekuensi imajiner.
6. Menghasilkan output yang dapat diproses dengan Molden atau software visualisasi lain.
7. Menjadi jalur lokal yang kuat untuk mahasiswa yang siap menggunakan terminal.

Contoh input sederhana ORCA untuk perhitungan optimasi dan frekuensi H₂O:

```
! B3LYP 6-31G(d) Opt Freq

* xyz 0 1
O    0.000000    0.000000    0.000000
H    0.758000    0.000000    0.504000
H   -0.758000    0.000000    0.504000
*
```

Pada contoh tersebut, `Opt` menunjukkan optimasi geometri, sedangkan `Freq` menunjukkan perhitungan frekuensi. Baris `xyz 0 1` menunjukkan bahwa koordinat diberikan dalam format Cartesian, muatan total molekul adalah 0, dan multiplicity adalah 1.

Mahasiswa harus memahami bahwa perhitungan frekuensi sebaiknya dilakukan setelah struktur benar-benar teroptimasi. Jika optimasi belum konvergen, frekuensi yang dihasilkan tidak boleh langsung ditafsirkan. Output ORCA perlu diperiksa untuk melihat status optimasi dan daftar frekuensi.

Kelebihan ORCA adalah fleksibilitas, kemampuan DFT yang kuat, dan kemudahan integrasi dengan software visualisasi. Keterbatasannya adalah mahasiswa harus terbiasa dengan file input, terminal, folder kerja, dan pembacaan output. Oleh karena itu, ORCA cocok untuk mahasiswa yang sudah mulai nyaman dengan komputasi berbasis teks.

5. Gaussian untuk Perhitungan Frekuensi dan Analisis IR

Gaussian merupakan paket kimia komputasi yang banyak digunakan dalam penelitian struktur elektronik. Dalam Praktikum 6, Gaussian dapat digunakan untuk optimasi geometri, perhitungan frekuensi, intensitas IR, dan visualisasi mode normal jika dipasangkan dengan GaussView. Penggunaan Gaussian harus dilakukan secara sah sesuai lisensi institusi.

Peran Gaussian dalam Praktikum 6:

1. Mengoptimasi geometri molekul.
2. Menghitung frekuensi harmonik.
3. Menampilkan intensitas IR.
4. Memberikan informasi mode normal.
5. Memeriksa frekuensi imajiner.
6. Menghasilkan output yang dapat dibaca oleh GaussView.
7. Membantu membangun spektrum IR komputasi.

Contoh input Gaussian untuk formaldehida:

```
%chk=formaldehida.chk
# B3LYP/6-31G(d) Opt Freq

Formaldehida optimasi dan frekuensi

0 1
C   0.000000    0.000000    0.000000
O   1.200000    0.000000    0.000000
H  -0.600000    0.935000    0.000000
H  -0.600000   -0.935000    0.000000
```

Kata kunci `Opt Freq` menunjukkan bahwa perhitungan mencakup optimasi geometri dan frekuensi. Output Gaussian biasanya menampilkan frekuensi dalam cm^{-1} , intensitas IR, dan informasi mode normal. Jika digunakan bersama GaussView, mahasiswa dapat melihat animasi mode vibrasi, yang sangat membantu untuk penugasan puncak.

Kelebihan Gaussian adalah ekosistem visualisasi dan dokumentasi yang luas. Keterbatasannya adalah status lisensi dan kebutuhan memahami input-output. Mahasiswa harus diingatkan bahwa software komersial hanya boleh digunakan jika tersedia lisensi resmi. Etika penggunaan software merupakan bagian dari integritas akademik.

6. Avogadro untuk Pembuatan Struktur Molekul

Avogadro digunakan untuk membangun struktur awal molekul dan memeriksa bentuk geometri sebelum perhitungan. Dalam Praktikum 6, Avogadro sangat berguna untuk membuat struktur H_2O , CO_2 , NH_3 , formaldehida, etanol, dan aseton. Struktur awal yang baik akan memudahkan optimasi geometri dan mengurangi risiko hasil frekuensi yang tidak valid.

Peran Avogadro dalam Praktikum 6:

1. Menggambar molekul model.
2. Menambahkan atom hidrogen secara lengkap.
3. Memeriksa valensi dan konektivitas atom.
4. Melakukan pembersihan geometri awal.
5. Menyimpan struktur dalam format XYZ atau format lain.
6. Membantu visualisasi bentuk molekul sebelum perhitungan.

7. Menyiapkan input untuk software komputasi.

Contoh penggunaan Avogadro:

Etanol

- gambar rantai C-C-O
- tambahkan H lengkap
- periksa gugus O-H
- lakukan clean geometry
- simpan sebagai etanol_awal.xyz

Untuk aseton:

Aseton

- buat rangka $\text{CH}_3\text{-C(=O)-CH}_3$
- periksa ikatan C=O
- tambahkan H lengkap
- lakukan clean geometry
- simpan sebagai aseton_awal.xyz

Avogadro sangat membantu, tetapi tidak boleh dianggap sebagai pengganti optimasi kuantum. Struktur yang tampak benar secara visual belum tentu merupakan minimum energi. Setelah struktur dibuat di Avogadro, optimasi tetap harus dilakukan dengan ChemCompute, GAMESS, ORCA, atau Gaussian.

Kesalahan umum pada tahap Avogadro adalah atom H kurang lengkap, ikatan rangkap C=O tidak benar, struktur etanol dibuat tidak realistis, atau konformasi awal terlalu buruk. Kesalahan ini dapat menyebabkan optimasi sulit konvergen atau menghasilkan frekuensi imajiner.

7. GaussView untuk Visualisasi Struktur dan Mode Normal

GaussView digunakan untuk membangun struktur, menyiapkan input Gaussian, membaca output, dan memvisualisasikan mode normal. Dalam Praktikum 6, GaussView sangat penting jika jalur Gaussian digunakan. Dengan GaussView, mahasiswa dapat melihat animasi vibrasi untuk setiap frekuensi, sehingga lebih mudah menentukan apakah suatu puncak merupakan regangan O-H, N-H, C=O, C-O, atau mode deformasi lain.

Peran GaussView dalam Praktikum 6:

1. Membuat struktur awal.
2. Menyiapkan file input Gaussian.
3. Membuka file output Gaussian.
4. Melihat daftar frekuensi dan intensitas IR.
5. Menampilkan animasi mode normal.
6. Membantu penugasan puncak IR.
7. Membantu memeriksa frekuensi imajiner.

Visualisasi mode normal sangat penting karena penugasan puncak berdasarkan angka saja dapat menyesatkan. Misalnya, puncak pada daerah tertentu mungkin tampak seperti C–O stretch, tetapi animasi mode menunjukkan bahwa gerak tersebut melibatkan banyak atom atau deformasi rangka. Dengan melihat animasi, mahasiswa dapat menulis penugasan yang lebih hati-hati.

Contoh penggunaan GaussView dalam analisis formaldehida:

```
buka output formaldehida
→ pilih mode sekitar daerah karbonil
→ lihat animasi gerak C=O
→ catat frekuensi dan intensitas
→ tulis penugasan sebagai regangan C=O dominan
```

GaussView juga dapat membantu memeriksa frekuensi imajiner. Jika ada frekuensi imajiner, animasi mode dapat menunjukkan arah gerak yang menyebabkan struktur tidak stabil. Dalam praktikum molekul stabil, frekuensi imajiner menandakan bahwa struktur perlu diperbaiki.

8. Molden untuk Membaca Output dan Mode Vibrasi

Molden merupakan software visualisasi molekul yang dapat membaca berbagai format output komputasi dan menampilkan struktur serta mode normal. Dalam Praktikum 6, Molden dapat digunakan untuk membuka output dari software seperti GAMESS, ORCA, atau Gaussian, bergantung format dan kompatibilitas file yang dihasilkan. Molden sangat berguna sebagai alat visualisasi mode vibrasi, terutama dalam lingkungan akademik yang menggunakan beberapa paket komputasi.

Peran Molden dalam Praktikum 6:

1. Membuka output komputasi.
2. Menampilkan struktur molekul.
3. Menampilkan daftar frekuensi vibrasi.
4. Memvisualisasikan mode normal.
5. Membantu penugasan puncak IR.
6. Membantu memeriksa mode imajiner.
7. Menjadi alternatif visualisasi selain GaussView.

Molden penting karena Praktikum 6 tidak hanya berfokus pada Gaussian. Jika mahasiswa menggunakan ORCA atau GAMESS, Molden dapat menjadi pilihan untuk memvisualisasikan mode vibrasi. Dengan visualisasi mode, mahasiswa dapat membedakan regangan, pembengkokan, puntiran, dan mode kolektif.

Contoh penggunaan Molden:

```
jalankan ORCA Opt Freq
→ hasilkan file output
→ buka output dengan Molden
```

- pilih frekuensi tertentu
- amati animasi mode normal
- catat jenis vibrasi dominan

Keterbatasan Molden adalah mahasiswa perlu memahami format file dan cara membuka output yang sesuai. Kadang diperlukan file tambahan atau format tertentu agar mode normal terbaca dengan baik. Oleh karena itu, mahasiswa harus mengikuti petunjuk software yang digunakan.

9. Python untuk Simulasi Spektrum IR dan Analisis Data

Python digunakan dalam Praktikum 6 untuk jalur mandiri. Jika ChemCompute, GAMESS, ORCA, atau Gaussian menghasilkan daftar frekuensi dan intensitas IR, maka Python digunakan untuk mengolah daftar tersebut menjadi spektrum simulasi, menerapkan faktor skala, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan spektrum dua molekul, dan menyimpan hasil dalam CSV.

Peran Python dalam Praktikum 6:

1. Membaca daftar frekuensi vibrasi.
2. Membaca intensitas IR.
3. Menerapkan faktor skala.
4. Membuat spektrum IR simulasi.
5. Menggunakan fungsi pelebaran puncak.
6. Mengidentifikasi puncak utama.
7. Membandingkan spektrum dua molekul.
8. Membuat grafik spektrum.
9. Menyimpan hasil analisis dalam CSV.

Python tidak menggantikan perhitungan frekuensi kuantum. Python tidak menghitung Hessian atau mode normal dari awal dalam praktikum ini. Python berfungsi sebagai alat analisis data setelah frekuensi dan intensitas diperoleh dari software komputasi.

Alur Python:

```
frekuensi + intensitas IR
→ faktor skala
→ pelebaran puncak
→ spektrum simulasi
→ identifikasi puncak utama
→ CSV dan grafik
```

Contoh data input Python:

```
Molekul: aseton
Frekuensi: 3050, 2960, 1715, 1450, 1360, 1220 cm-1
Intensitas: 15, 20, 280, 35, 25, 80
```

Data tersebut dapat diproses menjadi spektrum simulasi. Puncak kuat di sekitar daerah karbonil dapat ditugaskan sebagai regangan C=O. Setelah faktor skala diterapkan, frekuensi dapat bergeser mendekati nilai yang lebih realistis.

Dalam konteks pembelajaran, Python membuat mahasiswa memahami bahwa spektrum simulasi bukan sesuatu yang misterius. Spektrum dibangun dari daftar puncak diskrit yang diberi fungsi pelebaran. Dengan demikian, mahasiswa dapat memahami hubungan antara output numerik dan grafik spektrum.

10. Hubungan Antara Software Komputasi dan Software Visualisasi

Dalam Praktikum 6, software komputasi dan software visualisasi harus digunakan bersama. Software komputasi menghasilkan frekuensi dan intensitas. Software visualisasi membantu memahami mode normal. Python membantu menyusun spektrum dan data.

Hubungan tersebut dapat diringkas sebagai berikut:

Tahap	Software	Hasil
Struktur awal	Avogadro, GaussView	Geometri awal
Optimasi	ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian	Geometri teroptimasi
Frekuensi	ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian	Frekuensi dan intensitas IR
Visualisasi mode	GaussView, Molden, Avogadro	Animasi mode normal
Analisis spektrum	Python	Spektrum simulasi, puncak utama, CSV

Mahasiswa perlu memahami bahwa output angka frekuensi belum cukup. Untuk menugaskan puncak, mode normal harus dilihat. Misalnya, suatu frekuensi di sekitar daerah karbonil sebaiknya diperiksa melalui visualisasi untuk memastikan bahwa mode tersebut memang didominasi regangan C=O.

Dengan demikian, software visualisasi bukan hiasan, tetapi alat interpretasi ilmiah.

11. Alur Kerja Software Praktikum 6

Alur kerja software yang dianjurkan adalah:

1. Bangun struktur molekul dengan Avogadro atau GaussView.
2. Simpan struktur awal.
3. Jalankan optimasi geometri melalui ChemCompute, GAMESS, ORCA, atau Gaussian.

4. Pastikan optimasi selesai normal.
5. Jalankan perhitungan frekuensi.
6. Periksa ada tidaknya frekuensi imajiner.
7. Unduh atau simpan output perhitungan.
8. Buka output dengan GaussView atau Molden untuk melihat mode normal.
9. Catat frekuensi dan intensitas IR.
10. Masukkan data ke Python.
11. Terapkan faktor skala.
12. Buat spektrum IR simulasi.
13. Identifikasi puncak utama.
14. Bandingkan dua spektrum molekul.
15. Simpan CSV dan grafik.
16. Tulis analisis dalam laporan.

Alur ini penting karena Praktikum 6 memiliki risiko kesalahan pada beberapa tahap. Jika struktur awal salah, optimasi dapat bermasalah. Jika optimasi belum konvergen, frekuensi tidak valid. Jika frekuensi imajiner diabaikan, spektrum dapat ditafsirkan secara keliru. Jika mode normal tidak dilihat, penugasan puncak dapat salah. Jika faktor skala tidak dicatat, spektrum terkoreksi tidak dapat dievaluasi.

12. Contoh Alur Praktikum untuk Aseton

Aseton adalah molekul model penting karena memiliki gugus karbonil C=O. Contoh alur kerja untuk aseton adalah sebagai berikut:

Avogadro

- bangun struktur $\text{CH}_3\text{-C(=O)-CH}_3$
- simpan aseton_awal.xyz

ChemCompute atau ORCA/Gaussian

- optimasi geometri
- perhitungan frekuensi
- simpan output

GaussView atau Molden

- buka output
- amati mode C=O stretch
- catat frekuensi dan intensitas

Python

- masukkan frekuensi dan intensitas
- terapkan faktor skala
- buat spektrum IR simulasi
- identifikasi puncak C=O
- simpan CSV dan grafik

Analisis yang diharapkan:

Aseton memiliki gugus karbonil C=O. Mode regangan C=O biasanya muncul sebagai puncak kuat pada daerah karbonil karena vibrasi tersebut menghasilkan perubahan

momen dipol yang besar. Jika output frekuensi menunjukkan puncak kuat pada daerah tersebut, hasil ini konsisten dengan struktur aseton.

Contoh ini menunjukkan bagaimana software digunakan bukan sekadar untuk menghasilkan angka, tetapi untuk mendukung penjelasan kimia.

13. Contoh Alur Praktikum untuk Etanol

Etanol digunakan karena memiliki beberapa jenis ikatan penting: O–H, C–H, C–O, dan C–C. Spektrum etanol lebih kompleks daripada molekul kecil seperti H₂O atau CO₂.

Alur kerja etanol:

Avogadro

- bangun struktur CH₃CH₂OH
- periksa gugus O–H
- simpan etanol_awal.xyz

ChemCompute atau software lokal

- optimasi geometri
- perhitungan frekuensi
- simpan output

Molden atau GaussView

- lihat mode O–H stretch
- lihat mode C–H stretch
- lihat mode C–O stretch

Python

- buat spektrum IR simulasi
- terapkan faktor skala
- identifikasi puncak O–H, C–H, C–O
- simpan grafik dan CSV

Analisis yang diharapkan:

Etanol memiliki puncak O–H pada daerah frekuensi tinggi, puncak C–H pada daerah sekitar regangan C–H, dan puncak C–O pada daerah lebih rendah. Spektrum komputasi etanol membantu menunjukkan bahwa satu molekul organik sederhana dapat memiliki beberapa jenis puncak yang berasal dari gugus fungsi berbeda.

Etanol juga memberi kesempatan untuk membahas perbedaan antara spektrum komputasi molekul tunggal dan spektrum eksperimen cairan. Dalam eksperimen, O–H etanol dapat melebar akibat ikatan hidrogen antarmolekul. Dalam perhitungan molekul tunggal fase gas, puncak O–H sering lebih tajam. Ini menunjukkan pentingnya memahami model komputasi yang digunakan.

14. Kriteria Output Software yang Baik

Setiap software yang digunakan harus menghasilkan output yang dapat diperiksa. Output yang baik minimal memuat:

Komponen Output	Keterangan
Geometri teroptimasi	Struktur akhir setelah optimasi
Status optimasi	Konvergen atau tidak
Frekuensi vibrasi	Dalam cm^{-1}
Intensitas IR	Biasanya dalam satuan relatif atau km/mol
Frekuensi imajiner	Ada atau tidak
Mode normal	Dapat divisualisasikan
Metode	Misalnya HF, DFT, atau lainnya
Basis set	Misalnya 6-31G(d), STO-3G, atau lainnya
Muatan dan multiplicity	Harus sesuai molekul
File output	Disimpan sebagai bukti

Mahasiswa harus menyimpan output asli. Jangan hanya menyalin angka frekuensi ke laporan. Output asli diperlukan untuk verifikasi. Jika ada perbedaan atau kesalahan, dosen dapat memeriksa kembali sumber data.

15. Validasi Sebelum Analisis IR

Sebelum membuat spektrum IR simulasi, mahasiswa harus memvalidasi hasil perhitungan. Validasi meliputi:

1. Struktur molekul benar.
2. Optimasi geometri selesai normal.
3. Tidak ada frekuensi imajiner untuk molekul stabil.
4. Metode dan basis set tercatat.
5. Muatan dan multiplicity benar.
6. Frekuensi dan intensitas terbaca jelas.
7. Mode normal dapat divisualisasikan.
8. Data yang dimasukkan ke Python sesuai output.
9. Faktor skala dicatat.
10. File CSV dan grafik disimpan.

Jika validasi diabaikan, spektrum yang dihasilkan dapat menyesatkan. Misalnya, jika etanol masih memiliki frekuensi imajiner, maka spektrum IR yang dibuat dari output tersebut tidak boleh dianggap sebagai spektrum struktur minimum. Jika aseton belum teroptimasi dengan baik, puncak C=O dapat bergeser tidak wajar.

16. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software

Beberapa kesalahan umum dalam Praktikum 6 adalah:

Kesalahan	Dampak
Tidak mengoptimasi geometri sebelum frekuensi	Frekuensi tidak valid
Mengabaikan frekuensi imajiner	Struktur tidak minimum tetap dianalisis
Tidak mencatat metode dan basis set	Hasil tidak reproduibel
Salah membaca frekuensi negatif sebagai frekuensi biasa	Interpretasi geometri keliru
Tidak melihat mode normal	Penugasan puncak dapat salah
Menganggap semua puncak kuat sebagai gugus fungsi utama	Analisis terlalu dangkal
Tidak menerapkan faktor skala	Frekuensi komputasi dapat terlalu tinggi
Menggunakan faktor skala tanpa mencatatnya	Analisis tidak transparan
Tidak menyimpan output asli	Data sulit diverifikasi
Menganggap Python menghitung frekuensi kuantum	Kesalahan metodologis

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari karena Praktikum 6 bertujuan melatih mahasiswa membaca spektrum secara ilmiah, bukan sekadar menghasilkan grafik.

17. Etika dan Reprodusibilitas Penggunaan Software

Penggunaan software dalam Praktikum 6 harus memperhatikan etika akademik dan reprodusibilitas. Software komersial seperti Gaussian dan GaussView hanya boleh digunakan jika tersedia lisensi resmi. Software yang bebas digunakan atau bersifat open-source tetap harus digunakan sesuai ketentuan lisensinya. Mahasiswa tidak boleh menggunakan software bajakan atau mengambil output orang lain tanpa memahami prosesnya.

Reprodusibilitas menuntut agar semua langkah dapat ditelusuri:

```
struktur awal
→ input komputasi
→ output optimasi
→ output frekuensi
→ data frekuensi dan intensitas
→ spektrum Python
→ CSV dan grafik
→ laporan
```

Jika grafik spektrum IR muncul dalam laporan, pembaca harus dapat menelusuri dari mana data frekuensinya berasal, metode apa yang digunakan, apakah faktor skala diterapkan, dan bagaimana spektrum dibuat. Dengan demikian, software bukan hanya alat hitung, tetapi bagian dari rantai bukti ilmiah.

Struktur folder yang dianjurkan:

```
praktikum_06_spektrum_ir/
├── struktur_awal/
│   ├── h2o_awal.xyz
│   ├── co2_awal.xyz
│   ├── nh3_awal.xyz
│   ├── formaldehida_awal.xyz
│   ├── etanol_awal.xyz
│   └── aseton_awal.xyz
├── output_komputasi/
│   ├── h2o_freq.log
│   ├── co2_freq.log
│   ├── nh3_freq.log
│   ├── formaldehida_freq.log
│   ├── etanol_freq.log
│   └── aseton_freq.log
├── data/
│   └── data_frekuensi_intensitas.csv
├── kode/
│   └── praktikum_06_spektrum_ir.py
├── output_praktikum_06/
│   ├── tabel_frekuensi_intensitas.csv
│   ├── spektrum_ir_simulasi.png
│   ├── spektrum_ir_terkoreksi.png
│   └── daftar_puncak_utama.csv
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_06.docx
```

Struktur seperti ini membantu mahasiswa menjaga kerapian dan memudahkan pemeriksaan.

18. Implikasi Pedagogis Penggunaan Software

Penggunaan software dalam Praktikum 6 memiliki implikasi pedagogis yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa spektrum IR bukan sekadar tabel daerah gugus fungsi, tetapi hasil dari mode vibrasi molekul yang dapat dihitung dan divisualisasikan. Kedua, mahasiswa belajar bahwa struktur harus divalidasi melalui frekuensi. Ketiga, mahasiswa belajar bahwa intensitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol. Keempat, mahasiswa belajar bahwa faktor skala diperlukan karena model komputasi memiliki keterbatasan. Kelima, mahasiswa belajar bahwa data frekuensi dapat diolah menjadi spektrum simulasi menggunakan Python.

Dengan demikian, Praktikum 6 menggabungkan beberapa kemampuan:

1. Kemampuan membangun struktur molekul.

2. Kemampuan menjalankan perhitungan komputasi.
3. Kemampuan membaca output frekuensi.
4. Kemampuan memvisualisasikan mode normal.
5. Kemampuan membuat spektrum simulasi.
6. Kemampuan mengidentifikasi puncak utama.
7. Kemampuan menulis interpretasi kimia.
8. Kemampuan menjaga reproduibilitas data.

Software dalam Praktikum 6 tidak hanya berfungsi teknis, tetapi menjadi medium pembelajaran konseptual. Mahasiswa belajar menghubungkan bentuk molekul, gerak atom, energi vibrasi, perubahan momen dipol, dan spektrum IR.

19. Transisi ke Molekul Model

Subbab 9.3 telah membahas software yang digunakan dalam Praktikum 6, yaitu ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Avogadro, GaussView, Molden, dan Python. Setiap software memiliki peran berbeda dalam alur kerja: membangun struktur, mengoptimasi geometri, menghitung frekuensi, membaca intensitas IR, memvisualisasikan mode normal, membuat spektrum simulasi, menerapkan faktor skala, dan menyimpan hasil analisis.

Subbab berikutnya akan membahas molekul model yang digunakan dalam Praktikum 6, yaitu H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton. Molekul-molekul tersebut dipilih karena mewakili berbagai jenis vibrasi dan gugus fungsi penting, seperti O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O. Dengan memahami software terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap menjalankan perhitungan frekuensi dan menafsirkan spektrum IR dari setiap molekul model.

9.4 Molekul Model

Molekul model dalam Praktikum 6 dipilih untuk memperlihatkan hubungan antara **struktur molekul, mode normal, frekuensi vibrasi, intensitas IR, dan interpretasi gugus fungsi**. Pemilihan molekul tidak dilakukan secara acak, tetapi disusun secara bertahap dari molekul kecil yang sederhana menuju molekul organik yang lebih kompleks. Dengan cara ini, mahasiswa dapat mempelajari spektrum IR komputasi secara progresif: mulai dari mode vibrasi sederhana pada molekul triatomik, kemudian beralih ke molekul dengan lebih banyak atom, lebih banyak ikatan, dan lebih banyak puncak spektrum.

Molekul model dalam Praktikum 6 adalah:

1. **H₂O**
2. **CO₂**
3. **NH₃**
4. **Formaldehida**
5. **Etanol**
6. **Aseton**

Keenam molekul tersebut mewakili beberapa jenis vibrasi penting dalam spektroskopi IR, seperti regangan O–H, N–H, C–H, C=O, C–O, serta mode pembengkokan. H₂O dan CO₂ digunakan untuk memahami mode vibrasi molekul triatomik. NH₃ digunakan untuk memahami mode vibrasi molekul piramidal dengan ikatan N–H. Formaldehida dan aseton digunakan untuk mengenal puncak karbonil C=O. Etanol digunakan untuk memahami spektrum molekul organik sederhana yang memiliki O–H, C–H, dan C–O.

Dalam literatur spektroskopi dan kimia fisik, molekul-molekul kecil seperti H₂O, CO₂, dan NH₃ sering digunakan sebagai contoh dasar untuk menjelaskan mode normal, aktivitas IR, dan hubungan simetri dengan vibrasi. Molekul organik seperti formaldehida, etanol, dan aseton sering digunakan untuk menghubungkan teori vibrasi dengan identifikasi gugus fungsi. Dengan demikian, molekul model dalam Praktikum 6 tidak hanya berguna untuk latihan perhitungan, tetapi juga menjadi jembatan antara teori vibrasi molekul dan interpretasi spektrum IR yang umum digunakan dalam kimia analitik, kimia organik, kimia fisik, dan kimia komputasi.

1. Prinsip Pemilihan Molekul Model

Pemilihan molekul model dalam Praktikum 6 didasarkan pada beberapa prinsip.

Pertama, molekul harus **cukup sederhana untuk dihitung**. Semua molekul model dapat dihitung dengan metode komputasi dasar melalui ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software lain. Molekul seperti H₂O, CO₂, NH₃, dan formaldehida sangat ringan secara komputasi. Etanol dan aseton lebih kompleks, tetapi masih relatif mudah dihitung untuk praktikum.

Kedua, molekul harus **mewakili jenis vibrasi penting**. H₂O mewakili O–H stretching dan bending. CO₂ mewakili vibrasi molekul linear dan aktivitas IR yang bergantung pada perubahan momen dipol. NH₃ mewakili N–H stretching dan bending. Formaldehida dan aseton mewakili C=O stretching. Etanol mewakili O–H, C–H, dan C–O.

Ketiga, molekul harus **mewakili peningkatan kompleksitas spektrum**. H₂O dan CO₂ memiliki sedikit mode vibrasi. NH₃ dan formaldehida memiliki mode lebih banyak. Etanol dan aseton memiliki spektrum lebih kompleks karena jumlah atom dan jenis ikatannya lebih banyak.

Keempat, molekul harus **relevan secara kimia**. H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton adalah molekul yang sering dijumpai dalam kimia dasar, kimia organik, kimia lingkungan, biokimia, dan kimia industri. Dengan molekul yang familiar, mahasiswa dapat lebih mudah menghubungkan hasil komputasi dengan pengetahuan kimia yang sudah dimiliki.

Kelima, molekul harus **membantu membedakan spektrum komputasi dan eksperimen**. Misalnya, etanol dalam perhitungan molekul tunggal fase gas dapat menunjukkan puncak O–H yang relatif tajam, sedangkan spektrum eksperimen etanol cair sering menunjukkan O–H yang melebar akibat ikatan hidrogen. Perbedaan ini mengajarkan bahwa spektrum komputasi harus ditafsirkan sesuai model yang digunakan.

2. Ringkasan Molekul Model Praktikum 6

Ringkasan awal molekul model dapat disusun sebagai berikut:

Molekul	Rumus	Bentuk Umum	Jumlah Atom	Jumlah Mode Vibrasi	Fokus IR
Air	H ₂ O	Bengkok	3	3	O–H stretch, H–O–H bending
Karbon dioksida	CO ₂	Linear	3	4	Stretching dan bending CO ₂
Amonia	NH ₃	Piramidal trigonal	4	6	N–H stretch, H–N–H bending
Formaldehida	CH ₂ O	Planar	4	6	C=O stretch, C–H stretch
Etanol	C ₂ H ₆ O	Molekul organik fleksibel	9	21	O–H, C–H, C–O
Aseton	C ₃ H ₆ O	Karbonil keton	10	24	C=O, C–H, mode rangka

Jumlah mode vibrasi dihitung dengan rumus:

molekul nonlinier: $3N - 6$

molekul linear: $3N - 5$

H₂O, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton adalah molekul nonlinier. CO₂ adalah molekul linear. Karena itu, H₂O memiliki $3(3) - 6 = 3$ mode vibrasi, sedangkan CO₂ memiliki $3(3) - 5 = 4$ mode vibrasi.

Ringkasan tersebut membantu mahasiswa melihat bahwa semakin banyak atom dalam molekul, semakin banyak mode vibrasi yang muncul. Akibatnya, spektrum molekul organik seperti etanol dan aseton lebih kompleks daripada spektrum H₂O atau CO₂.

3. H₂O sebagai Model Vibrasi O–H dan Molekul Bengkok

H₂O atau air digunakan sebagai molekul model pertama karena strukturnya sederhana, tetapi sangat kaya secara konseptual. Molekul H₂O berbentuk bengkok dan memiliki tiga atom. Karena H₂O adalah molekul nonlinier, jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 6 = 3(3) - 6 = 3$$

Tiga mode vibrasi utama H₂O adalah:

1. Regangan simetris O–H.
2. Regangan antisimetri O–H.
3. Pembengkokan H–O–H.

Regangan O–H muncul pada frekuensi tinggi karena ikatan O–H relatif kuat dan melibatkan atom H yang sangat ringan. Pembengkokan H–O–H muncul pada frekuensi lebih rendah karena mengubah sudut ikatan umumnya memerlukan energi lebih kecil daripada meregangkan ikatan.

Secara konseptual:

H₂O
 → ikatan O–H kuat
 → H ringan
 → frekuensi regangan O–H tinggi

H₂O
 → perubahan sudut H–O–H
 → mode bending
 → frekuensi lebih rendah daripada stretching

Dalam Praktikum 6, H₂O membantu mahasiswa memahami beberapa hal. Pertama, jumlah mode vibrasi dapat dihitung dengan rumus $3N - 6$. Kedua, mode normal dapat dibedakan menjadi stretching dan bending. Ketiga, vibrasi O–H menjadi contoh mengapa ikatan yang melibatkan H sering muncul pada frekuensi tinggi. Keempat, karena H₂O bersifat polar dan vibrasinya dapat mengubah momen dipol, mode-mode vibrasinya relevan dalam IR.

Data yang perlu dicatat untuk H₂O:

Aspek	Keterangan
Molekul	H ₂ O
Bentuk	Bengkok
Jumlah atom	3
Jumlah mode vibrasi	3
Vibrasi penting	O–H stretch, H–O–H bending
Fokus analisis	Hubungan O–H dengan frekuensi tinggi

Contoh analisis laporan:

H₂O memiliki tiga mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan tiga atom. Mode regangan O–H muncul pada frekuensi tinggi karena ikatan O–H relatif kuat dan melibatkan atom H yang ringan. Mode pembengkokan H–O–H muncul pada frekuensi lebih rendah karena perubahan sudut ikatan memerlukan energi lebih kecil daripada regangan ikatan.

H₂O juga berguna untuk menghubungkan Bab 8 dan Bab 9. Pada Bab 8, H₂O dibahas sebagai molekul polar karena bentuknya bengkok. Pada Bab 9, H₂O dibahas sebagai molekul yang memiliki mode vibrasi O–H dan bending yang dapat muncul dalam spektrum IR.

4. CO₂ sebagai Model Molekul Linear dan Aktivitas IR

CO₂ atau karbon dioksida digunakan sebagai molekul model kedua. Molekul ini sangat penting karena memperlihatkan perbedaan antara **momen dipol permanen** dan **perubahan momen dipol selama vibrasi**. Pada keadaan setimbang, CO₂ bersifat nonpolar karena strukturnya linear dan dua vektor C=O saling meniadakan. Namun, beberapa mode vibrasinya dapat aktif IR karena selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol sesaat.

CO₂ adalah molekul linear dengan tiga atom. Karena linear, jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 5 = 3(3) - 5 = 4$$

Empat mode vibrasi tersebut mencakup regangan simetris, regangan antisimetri, dan dua mode pembengkokan degenerat. Mode pembengkokan degenerat berarti terdapat dua mode bending dengan frekuensi sama, tetapi terjadi pada bidang yang berbeda.

Secara konseptual:

CO₂
 → linear
 → nonpolar pada keadaan setimbang

CO₂
 → vibrasi antisimetri atau bending
 → momen dipol sesaat berubah
 → mode dapat aktif IR

CO₂ penting untuk menunjukkan bahwa molekul nonpolar permanen tetap dapat memiliki puncak IR. Aktivitas IR tidak ditentukan hanya oleh ada tidaknya momen dipol permanen, tetapi oleh ada tidaknya perubahan momen dipol selama vibrasi.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	CO ₂
Bentuk	Linear
Jumlah atom	3
Jumlah mode vibrasi	4
Vibrasi penting	C=O stretch, bending CO ₂
Fokus analisis	Molekul nonpolar dengan mode IR aktif

Contoh analisis laporan:

CO₂ memiliki empat mode vibrasi karena merupakan molekul linear dengan tiga atom. Meskipun CO₂ tidak memiliki momen dipol permanen pada keadaan setimbang, beberapa mode vibrasinya aktif IR karena menyebabkan perubahan momen dipol sesaat. Hal ini menunjukkan bahwa aktivitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi, bukan hanya pada polaritas permanen molekul.

CO₂ juga menjadi molekul penting untuk menjelaskan konsep degenerasi. Dua mode bending CO₂ memiliki energi sama karena simetri molekul linear. Dalam visualisasi mode normal, mahasiswa dapat melihat bahwa pembengkokan dapat terjadi pada dua arah yang saling tegak lurus.

5. NH₃ sebagai Model Vibrasi N–H dan Molekul Piramidal

NH₃ atau amonia digunakan untuk memperkenalkan vibrasi N–H pada molekul piramidal trigonal. Molekul ini memiliki satu atom N dan tiga atom H, sehingga jumlah atomnya adalah 4. Karena NH₃ nonlinier, jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 6 = 3(4) - 6 = 6$$

Mode vibrasi NH₃ meliputi regangan N–H dan pembengkokan H–N–H. Karena ikatan N–H melibatkan atom H yang ringan, mode stretching N–H muncul pada daerah frekuensi tinggi. Namun, posisi N–H biasanya berbeda dari O–H karena kekuatan ikatan dan lingkungan kimianya tidak sama.

NH₃ juga penting karena memiliki bentuk piramidal trigonal dan momen dipol permanen. Vibrasi NH₃ dapat menyebabkan perubahan momen dipol sehingga beberapa mode aktif IR.

Secara konseptual:

NH₃
 → ikatan N–H
 → H ringan
 → frekuensi stretching relatif tinggi

NH₃
 → bentuk piramidal trigonal
 → mode vibrasi dapat mengubah momen dipol
 → aktif IR

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	NH ₃
Bentuk	Piramidal trigonal
Jumlah atom	4
Jumlah mode vibrasi	6
Vibrasi penting	N–H stretch, H–N–H bending
Fokus analisis	Vibrasi N–H dan mode molekul piramidal

Contoh analisis laporan:

NH₃ memiliki enam mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan empat atom. Mode regangan N–H muncul pada frekuensi tinggi karena melibatkan atom H

yang ringan. Mode pembengkokan H-N-H muncul pada frekuensi lebih rendah. Bentuk piramidal trigonal NH_3 menyebabkan beberapa mode vibrasinya aktif IR karena menghasilkan perubahan momen dipol.

NH_3 juga dapat dibandingkan dengan H_2O . Keduanya memiliki ikatan dengan H dan mode stretching pada frekuensi tinggi. Namun, H_2O memiliki O-H, sedangkan NH_3 memiliki N-H. Perbedaan atom pusat, kekuatan ikatan, dan geometri menyebabkan perbedaan pola spektrum.

6. Formaldehida sebagai Model Karbonil Sederhana

Formaldehida atau metanal memiliki rumus CH_2O . Molekul ini digunakan sebagai model karbonil paling sederhana. Struktur formaldehida terdiri atas satu atom C yang berikatan rangkap dengan O dan berikatan tunggal dengan dua atom H. Molekul ini memiliki empat atom dan bersifat nonlinier, sehingga jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 6 = 3(4) - 6 = 6$$

Formaldehida sangat penting dalam Praktikum 6 karena memperkenalkan regangan C=O. Gugus karbonil C=O merupakan salah satu gugus fungsi paling penting dalam spektroskopi IR. Regangan C=O sering menghasilkan puncak kuat karena ikatan C=O polar dan perubahan panjang ikatan C=O selama vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol yang signifikan.

Secara konseptual:

Formaldehida

- memiliki gugus C=O
- regangan C=O menghasilkan perubahan momen dipol besar
- puncak IR C=O kuat

Selain C=O, formaldehida juga memiliki regangan C-H dan mode pembengkokan H-C-H. Karena jumlah atomnya masih sedikit, formaldehida merupakan jembatan yang baik antara molekul kecil seperti H_2O dan NH_3 dengan molekul organik yang lebih kompleks seperti etanol dan aseton.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	Formaldehida
Rumus	CH_2O
Jumlah atom	4
Jumlah mode vibrasi	6
Vibrasi penting	C=O stretch, C-H stretch
Fokus analisis	Karbonil sederhana dan puncak C=O kuat

Contoh analisis laporan:

Formaldehida memiliki enam mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan empat atom. Salah satu mode terpenting adalah regangan C=O. Puncak C=O biasanya kuat dalam IR karena vibrasi karbonil menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Formaldehida menjadi model sederhana untuk memahami karakter spektrum gugus karbonil.

Formaldehida juga berguna untuk memperkenalkan bahwa puncak C=O tidak hanya ditentukan oleh keberadaan ikatan rangkap, tetapi juga dipengaruhi oleh lingkungan kimia. Pada molekul yang lebih besar, posisi C=O dapat bergeser akibat substituen, konjugasi, atau interaksi antarmolekul.

7. Etanol sebagai Model O–H, C–H, dan C–O dalam Molekul Organik

Etanol memiliki rumus C_2H_6O dan struktur CH_3CH_2OH . Etanol digunakan sebagai model molekul organik sederhana yang memiliki beberapa jenis ikatan penting: O–H, C–H, C–C, C–O, dan mode deformasi rangka. Etanol memiliki 9 atom dan bersifat nonlinier, sehingga jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 6 = 3(9) - 6 = 21$$

Jumlah mode yang cukup banyak membuat spektrum etanol lebih kompleks daripada H_2O , CO_2 , NH_3 , atau formaldehida. Namun, kompleksitas ini justru penting karena spektrum molekul organik nyata biasanya memiliki banyak puncak.

Etanol memperkenalkan beberapa daerah IR penting:

1. Regangan O–H pada daerah frekuensi tinggi.
2. Regangan C–H pada daerah sekitar $2800\text{--}3100\text{ cm}^{-1}$.
3. Regangan C–O pada daerah lebih rendah.
4. Berbagai mode bending dan mode rangka pada daerah fingerprint.

Secara konseptual:

Etanol
→ memiliki O–H
→ puncak O–H frekuensi tinggi

Etanol
→ memiliki C–H
→ puncak C–H pada daerah regangan C–H

Etanol
→ memiliki C–O
→ puncak C–O pada daerah lebih rendah

Etanol juga sangat penting untuk membahas perbedaan antara spektrum komputasi dan spektrum eksperimen. Dalam perhitungan molekul tunggal fase gas, O–H etanol sering tampak sebagai

mode yang relatif tajam. Dalam spektrum eksperimen cairan, puncak O–H sering melebar karena ikatan hidrogen antarmolekul. Perbedaan ini menunjukkan bahwa model komputasi harus ditafsirkan sesuai kondisi yang dimodelkan.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	Etanol
Rumus	C ₂ H ₆ O
Jumlah atom	9
Jumlah mode vibrasi	21
Vibrasi penting	O–H, C–H, C–O
Fokus analisis	Spektrum organik sederhana dan efek gugus fungsi

Contoh analisis laporan:

Etanol memiliki 21 mode vibrasi karena terdiri atas sembilan atom dan merupakan molekul nonlinier. Spektrumnya lebih kompleks daripada molekul kecil karena memiliki beberapa jenis ikatan, seperti O–H, C–H, dan C–O. Puncak O–H muncul pada frekuensi tinggi, sedangkan C–O muncul pada daerah lebih rendah. Perbedaan antara spektrum komputasi molekul tunggal dan spektrum eksperimen perlu diperhatikan, terutama untuk O–H yang dapat dipengaruhi ikatan hidrogen.

Etanol membantu mahasiswa memahami bahwa spektrum IR tidak hanya berfungsi mengenali satu ikatan, tetapi membaca keseluruhan pola gugus fungsi dalam molekul.

8. Aseton sebagai Model Karbonil Keton

Aseton memiliki rumus C₃H₆O dan struktur CH₃–C(=O)–CH₃. Molekul ini digunakan sebagai model karbonil keton. Aseton memiliki 10 atom dan bersifat nonlinier, sehingga jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 6 = 3(10) - 6 = 24$$

Aseton penting karena memiliki gugus karbonil C=O yang biasanya menghasilkan puncak kuat dalam IR. Dibanding formaldehida, aseton memiliki lingkungan karbonil yang berbeda karena atom karbonil terikat pada dua gugus metil. Hal ini dapat memengaruhi posisi frekuensi C=O dan pola spektrum secara keseluruhan.

Secara konseptual:

Aseton
 → gugus C=O keton
 → puncak C=O kuat

Aseton

- dua gugus CH_3
- banyak mode C-H dan bending
- spektrum lebih kompleks

Aseton juga memberi kesempatan untuk membandingkan puncak karbonil pada formaldehida dan aseton. Keduanya memiliki $\text{C}=\text{O}$, tetapi lingkungan kimia berbeda. Perbedaan lingkungan dapat menyebabkan pergeseran frekuensi karbonil. Dalam analisis komputasi, mahasiswa dapat melihat apakah puncak $\text{C}=\text{O}$ pada formaldehida dan aseton muncul pada daerah yang mirip atau mengalami pergeseran tertentu.

Data yang perlu dicatat:

Aspek	Keterangan
Molekul	Aseton
Rumus	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$
Jumlah atom	10
Jumlah mode vibrasi	24
Vibrasi penting	$\text{C}=\text{O}$ stretch, C-H stretch, mode CH_3
Fokus analisis	Karbonil keton dan spektrum organik

Contoh analisis laporan:

Aseton memiliki 24 mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan 10 atom. Mode paling penting dalam interpretasi IR adalah regangan $\text{C}=\text{O}$, yang biasanya muncul sebagai puncak kuat karena menyebabkan perubahan momen dipol besar. Selain itu, gugus metil pada aseton menghasilkan banyak mode C-H stretching dan bending, sehingga spektrumnya lebih kompleks daripada formaldehida.

Aseton juga menjadi contoh bahwa puncak yang kuat sering berkaitan dengan perubahan momen dipol yang besar. Regangan $\text{C}=\text{O}$ pada aseton biasanya sangat informatif untuk identifikasi gugus karbonil.

9. Perbandingan Molekul Kecil dan Molekul Organik

Molekul dalam Praktikum 6 dapat dibagi menjadi dua kelompok besar: molekul kecil dan molekul organik.

Molekul kecil:

1. H_2O
2. CO_2
3. NH_3

Molekul organik:

1. Formaldehida
2. Etanol
3. Aseton

Molekul kecil memiliki sedikit mode vibrasi sehingga cocok untuk memahami dasar teori mode normal. Molekul organik memiliki lebih banyak mode vibrasi sehingga cocok untuk memahami interpretasi spektrum gugus fungsi.

Perbandingan:

Aspek	Molekul Kecil	Molekul Organik
Jumlah atom	Sedikit	Lebih banyak
Jumlah mode vibrasi	Sedikit	Lebih banyak
Spektrum	Lebih sederhana	Lebih kompleks
Fokus	Mode normal dasar	Gugus fungsi
Contoh	H ₂ O, CO ₂ , NH ₃	Formaldehida, etanol, aseton

Perbandingan ini penting karena mahasiswa dapat membangun pemahaman bertahap. Mereka mulai dari H₂O dan CO₂ untuk memahami mode normal, lalu beralih ke etanol dan aseton untuk melihat bagaimana konsep yang sama diterapkan pada spektrum organik yang lebih kompleks.

10. Perbandingan H₂O dan CO₂

H₂O dan CO₂ sama-sama molekul triatomik, tetapi berbeda bentuk dan jumlah mode vibrasi.

Aspek	H ₂ O	CO ₂
Bentuk	Bengkok	Linear
Jumlah atom	3	3
Rumus mode vibrasi	$3N - 6$	$3N - 5$
Jumlah mode	3	4
Polaritas permanen	Polar	Nonpolar
Fokus IR	O–H stretch dan bending	Stretching dan bending CO ₂

Perbedaan ini penting. H₂O memiliki tiga mode vibrasi karena nonlinier, sedangkan CO₂ memiliki empat mode vibrasi karena linear. CO₂ juga menunjukkan bahwa molekul nonpolar permanen tetap dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol.

Contoh analisis:

H₂O dan CO₂ sama-sama memiliki tiga atom, tetapi jumlah mode vibrasinya berbeda karena H₂O nonlinier sedangkan CO₂ linear. H₂O memiliki tiga mode vibrasi, sedangkan CO₂ memiliki empat mode vibrasi. Perbedaan ini menunjukkan bahwa bentuk molekul memengaruhi jumlah mode normal dan karakter spektrum IR.

11. Perbandingan Formaldehida dan Aseton

Formaldehida dan aseton sama-sama memiliki gugus karbonil C=O, tetapi berbeda ukuran dan lingkungan kimia. Formaldehida memiliki karbonil yang terikat pada dua atom H, sedangkan aseton memiliki karbonil yang terikat pada dua gugus metil.

Aspek	Formaldehida	Aseton
Rumus	CH ₂ O	C ₃ H ₆ O
Jumlah atom	4	10
Jumlah mode vibrasi	6	24
Gugus utama	C=O	C=O keton
Spektrum	Relatif sederhana	Lebih kompleks
Fokus	Karbonil sederhana	Karbonil dalam keton

Perbandingan ini membantu mahasiswa memahami bahwa puncak C=O dapat muncul pada kedua molekul, tetapi spektrum aseton lebih kompleks karena terdapat lebih banyak atom dan mode vibrasi.

Contoh analisis:

Formaldehida dan aseton sama-sama memiliki gugus C=O sehingga keduanya diharapkan menampilkan puncak karbonil yang kuat. Namun, aseton memiliki lebih banyak atom dan dua gugus metil, sehingga jumlah mode vibrasinya lebih banyak dan spektrumnya lebih kompleks daripada formaldehida.

Perbandingan ini juga menjadi dasar untuk subbab analisis, ketika mahasiswa menghubungkan puncak IR dengan C=O.

12. Perbandingan Etanol dan Aseton

Etanol dan aseton sama-sama molekul organik sederhana, tetapi memiliki gugus fungsi berbeda. Etanol memiliki gugus O–H dan C–O, sedangkan aseton memiliki C=O.

Aspek	Etanol	Aseton
Rumus	C ₂ H ₆ O	C ₃ H ₆ O
Gugus utama	O–H, C–O	C=O
Puncak khas	O–H, C–O	C=O
Jumlah mode vibrasi	21	24
Fokus	Alkohol	Keton

Perbandingan ini sangat berguna untuk interpretasi gugus fungsi. Etanol seharusnya menunjukkan puncak O–H dan C–O, sedangkan aseton menunjukkan puncak C=O yang kuat. Dengan membandingkan spektrum keduanya, mahasiswa dapat memahami bagaimana spektrum IR digunakan untuk membedakan alkohol dan keton.

Contoh analisis:

Etanol dan aseton memiliki rumus molekul yang sama-sama mengandung C, H, dan O, tetapi gugus fungsinya berbeda. Etanol memiliki O-H dan C-O, sedangkan aseton memiliki C=O. Karena itu, spektrum IR keduanya berbeda. Etanol menampilkan ciri O-H dan C-O, sedangkan aseton menampilkan puncak karbonil C=O yang kuat.

Perbandingan ini menjadi dasar penting untuk identifikasi gugus fungsi melalui IR.

13. Data Minimum untuk Setiap Molekul Model

Untuk setiap molekul model, mahasiswa harus mengumpulkan data minimum berikut:

1. Nama molekul.
2. Rumus molekul.
3. Jumlah atom.
4. Bentuk molekul.
5. Linear atau nonlinier.
6. Jumlah mode vibrasi.
7. Frekuensi hasil komputasi.
8. Intensitas IR.
9. Ada atau tidaknya frekuensi imajiner.
10. Frekuensi setelah faktor skala.
11. Puncak utama.
12. Penugasan mode vibrasi.
13. Gugus fungsi atau ikatan dominan.
14. Catatan perbandingan dengan molekul lain.

Format tabel awal:

Molekul	Rumus	Linear/Nonlinier	Jumlah Mode	Ikatan Penting	Fokus Puncak IR
H ₂ O	H ₂ O	Nonlinier	3	O-H	O-H stretch, bending
CO ₂	CO ₂	Linear	4	C=O	Stretching, bending
NH ₃	NH ₃	Nonlinier	6	N-H	N-H stretch, bending
Formaldehida	CH ₂ O	Nonlinier	6	C=O, C-H	C=O stretch
Etanol	C ₂ H ₆ O	Nonlinier	21	O-H, C-H, C-O	O-H, C-O
Aseton	C ₃ H ₆ O	Nonlinier	24	C=O, C-H	C=O stretch

Tabel ini menjadi panduan sebelum mahasiswa menjalankan ChemCompute atau Python.

14. Kesalahan Umum dalam Memahami Molekul Model

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Penjelasan
Mengira semua molekul triatomik memiliki jumlah mode sama	Salah; H ₂ O nonlinier memiliki 3 mode, CO ₂ linear memiliki 4 mode
Menganggap molekul nonpolar tidak memiliki mode IR aktif	Salah; CO ₂ dapat memiliki mode IR aktif
Menganggap semua puncak O–H eksperimen sama dengan komputasi fase gas	Salah; ikatan hidrogen dapat mengubah bentuk puncak
Menganggap C=O selalu muncul pada posisi persis sama	Salah; lingkungan kimia memengaruhi frekuensi
Menugaskan puncak hanya dari angka tanpa melihat mode normal	Berisiko salah
Mengabaikan frekuensi imajiner	Struktur belum valid tetap dianalisis
Menganggap etanol hanya memiliki puncak O–H	Salah; etanol juga memiliki C–H, C–O, dan mode lain
Menganggap aseton hanya memiliki C=O	Salah; aseton juga memiliki banyak mode C–H dan CH ₃
Tidak menghitung jumlah mode vibrasi	Output sulit diverifikasi
Tidak membedakan stretching dan bending	Analisis spektrum menjadi dangkal

Kesalahan-kesalahan ini muncul karena mahasiswa sering menghafal daerah IR tanpa memahami mode normal. Praktikum 6 harus melatih mahasiswa melihat spektrum sebagai hasil gerak atom, bukan sebagai daftar angka hafalan.

15. Implikasi Pemilihan Molekul Model terhadap Pembelajaran

Pemilihan H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton memiliki implikasi pembelajaran yang kuat.

Pertama, mahasiswa belajar dari molekul kecil. H₂O dan CO₂ membantu memahami dasar jumlah mode vibrasi dan hubungan bentuk molekul dengan mode normal.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa aktivitas IR tidak hanya ditentukan oleh polaritas permanen. CO₂ menjadi contoh bahwa molekul nonpolar dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol.

Ketiga, mahasiswa belajar mengenali gugus fungsi. Formaldehida dan aseton memperkenalkan C=O, sedangkan etanol memperkenalkan O–H dan C–O.

Keempat, mahasiswa belajar bahwa spektrum molekul organik lebih kompleks. Etanol dan aseton memiliki banyak mode vibrasi karena jumlah atomnya lebih besar.

Kelima, mahasiswa belajar membandingkan spektrum. Perbandingan formaldehida-aseton dan etanol-aseton membantu membangun pemahaman bahwa IR dapat digunakan untuk membedakan gugus fungsi.

Secara umum, alur pembelajaran molekul model adalah:

H₂O dan CO₂
→ mode normal dasar

NH₃
→ vibrasi N-H dan molekul piramidal

Formaldehida
→ karbonil sederhana

Etanol
→ alkohol dan spektrum organik

Aseton
→ keton dan karbonil kuat

Dengan alur ini, mahasiswa memahami spektrum IR secara bertahap dan sistematis.

16. Transisi ke Jalur ChemCompute

Subbab 9.4 telah membahas molekul model yang digunakan dalam Praktikum 6, yaitu H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton. Setiap molekul dipilih karena mewakili konsep penting dalam frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi. H₂O dan CO₂ membantu memahami mode vibrasi molekul kecil. NH₃ memperkenalkan vibrasi N-H. Formaldehida dan aseton memperkenalkan puncak karbonil C=O. Etanol memperkenalkan O-H, C-H, dan C-O dalam molekul organik sederhana.

Subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Pada subbab 9.5, mahasiswa akan menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi untuk molekul-molekul model tersebut, kemudian mengunduh output vibrasi dan intensitas IR. Dengan memahami karakter setiap molekul terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap membaca output frekuensi, mengenali puncak utama, dan menafsirkan spektrum IR secara ilmiah.

9.5 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 6 digunakan untuk menjalankan **optimasi geometri** dan **perhitungan frekuensi vibrasi**, kemudian mengunduh output yang memuat **frekuensi vibrasi**, **mode normal**, dan **intensitas IR**. Jalur ini menjadi tahap komputasi utama sebelum mahasiswa

mengolah data lebih lanjut dengan Python pada subbab berikutnya. Dengan ChemCompute, mahasiswa dapat memperoleh data frekuensi dan intensitas IR dari molekul model seperti H_2O , CO_2 , NH_3 , formaldehida, etanol, dan aseton tanpa harus sejak awal menguasai instalasi lokal GAMESS, ORCA, atau Gaussian.

Namun, ChemCompute harus dipahami dengan benar. ChemCompute adalah **platform akses komputasi berbasis web**, bukan nama metode kimia kuantum. Di dalam ChemCompute, perhitungan dapat dijalankan melalui paket komputasi tertentu yang tersedia. Oleh karena itu, laporan praktikum tidak cukup menulis bahwa “perhitungan dilakukan dengan ChemCompute”. Mahasiswa harus mencatat paket komputasi, metode, basis set, muatan, multiplicity, jenis job, status optimasi, dan hasil frekuensi. Kedisiplinan ini penting agar hasil praktikum dapat ditelusuri, diperiksa, dan direproduksi.

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 6 mengikuti alur umum berikut:

```
membangun struktur molekul
→ mengatur muatan dan multiplicity
→ memilih metode dan basis set
→ menjalankan optimasi geometri
→ menjalankan perhitungan frekuensi
→ memeriksa frekuensi imajiner
→ membaca frekuensi dan intensitas IR
→ mengunduh output
→ menyusun data untuk analisis Python dan laporan
```

Alur tersebut menunjukkan bahwa perhitungan frekuensi tidak boleh dilakukan secara sembarangan. Frekuensi vibrasi harus dihitung pada struktur yang sudah teroptimasi. Jika struktur belum benar-benar minimum, hasil frekuensi dapat memuat frekuensi imajiner atau menghasilkan spektrum yang tidak layak ditafsirkan.

Dalam literatur kimia komputasi, perhitungan frekuensi merupakan tahap penting setelah optimasi geometri. Jensen, Cramer, Leach, Lewars, Levine, Atkins dan Friedman, serta Wilson, Decius, dan Cross menekankan bahwa frekuensi vibrasi berkaitan dengan kelengkungan permukaan energi potensial di sekitar struktur minimum. Karena itu, jalur ChemCompute pada Praktikum 6 harus dilaksanakan dengan pemahaman bahwa output frekuensi bukan sekadar daftar angka, melainkan hasil dari model fisika molekul yang berlandaskan teori vibrasi dan kimia kuantum.

1. Kedudukan Jalur ChemCompute dalam Praktikum 6

Jalur ChemCompute memiliki kedudukan sebagai jalur praktis untuk memperoleh data frekuensi dan intensitas IR. Jika pada jalur Python mahasiswa mengolah data frekuensi dan intensitas menjadi spektrum simulasi, maka pada jalur ChemCompute mahasiswa menghasilkan data awalnya. Dengan demikian, ChemCompute menjadi sumber data komputasi, sedangkan Python menjadi alat analisis dan visualisasi data.

Hubungan keduanya dapat digambarkan sebagai berikut:

ChemCompute
 → optimasi geometri
 → frekuensi vibrasi
 → intensitas IR
 → output komputasi

Python
 → membaca frekuensi dan intensitas
 → faktor skala
 → spektrum simulasi
 → puncak utama
 → CSV dan grafik

Dengan pembagian ini, mahasiswa dapat memahami bahwa setiap tahap memiliki fungsi berbeda. ChemCompute digunakan untuk menjalankan perhitungan kimia kuantum, sedangkan Python digunakan untuk mengolah hasilnya menjadi bentuk yang lebih mudah dianalisis.

Jalur ChemCompute juga memiliki nilai pedagogis. Mahasiswa dapat belajar bahwa perhitungan spektrum IR tidak muncul dari daftar daerah gugus fungsi yang dihafal, tetapi dari struktur molekul yang dihitung. Ketika mahasiswa memperoleh frekuensi O–H, N–H, C=O, C–O, atau C–H dari output, mereka belajar bahwa setiap puncak spektrum memiliki dasar gerak vibrasi molekul.

2. Persiapan Struktur Molekul

Tahap pertama jalur ChemCompute adalah menyiapkan struktur molekul. Struktur dapat dibuat langsung pada antarmuka ChemCompute jika tersedia editor molekul, atau dibuat terlebih dahulu dengan software seperti Avogadro atau GaussView. Struktur awal harus wajar secara kimia karena struktur yang buruk dapat membuat optimasi sulit konvergen atau menghasilkan frekuensi imajiner.

Molekul model yang digunakan adalah:

Molekul	Fokus Struktur	Hal yang Perlu Diperiksa
H ₂ O	Molekul bengkok	Dua H terikat pada O, sudut tidak linear
CO ₂	Molekul linear	O=C=O tersusun linear
NH ₃	Piramidal trigonal	Tiga H terikat pada N, bentuk tidak planar
Formaldehida	Karbonil sederhana	C=O benar, dua H terikat pada C
Etanol	Alkohol	Struktur CH ₃ CH ₂ OH, gugus O–H lengkap
Aseton	Keton	Struktur CH ₃ –C(=O)–CH ₃ benar

Pada tahap ini, mahasiswa harus memastikan bahwa semua atom H lengkap. Kesalahan yang sering terjadi adalah formaldehida dibuat tanpa dua atom H, etanol dibuat tanpa H pada gugus O–H, atau aseton dibuat dengan ikatan C=O yang tidak benar. Kesalahan struktur awal akan berdampak pada seluruh hasil perhitungan.

Nama file struktur awal yang dianjurkan:

```
h2o_awal.xyz
co2_awal.xyz
nh3_awal.xyz
formaldehida_awal.xyz
etanol_awal.xyz
aseton_awal.xyz
```

Penamaan file awal penting agar mahasiswa dapat menelusuri hubungan antara struktur, input, output, dan laporan. Praktikum komputasi yang baik harus menjaga rantai data sejak struktur awal sampai grafik akhir.

3. Pengaturan Muatan dan Multiplicity

Setelah struktur disiapkan, mahasiswa harus mengatur **muatan total** dan **multiplicity**. Semua molekul model dalam Praktikum 6 adalah molekul netral dengan keadaan dasar singlet. Oleh karena itu, pengaturan umum adalah:

```
muatan total = 0
multiplicity = 1
```

Tabel ringkas:

Molekul	Muatan Total	Multiplicity
H ₂ O	0	1
CO ₂	0	1
NH ₃	0	1
Formaldehida	0	1
Etanol	0	1
Aseton	0	1

Kesalahan muatan atau multiplicity dapat menghasilkan struktur elektronik yang salah. Misalnya, jika molekul netral dimasukkan sebagai bermuatan, distribusi elektron dan frekuensi vibrasi akan berubah. Jika multiplicity salah, perhitungan dapat menggambarkan keadaan elektronik yang tidak sesuai dengan molekul model.

Dalam laporan, mahasiswa sebaiknya menulis:

Semua molekul model dihitung sebagai molekul netral dengan muatan total 0 dan multiplicity 1.

Pernyataan ini sederhana tetapi penting untuk reproduktibilitas.

4. Pemilihan Metode dan Basis Set

Tahap berikutnya adalah memilih metode dan basis set. Dalam praktikum dasar, metode yang digunakan dapat berupa HF, DFT, atau metode lain yang tersedia di ChemCompute. Untuk pembelajaran spektrum IR, DFT sering digunakan karena memberikan keseimbangan yang baik antara kualitas hasil dan biaya komputasi. Namun, metode yang dipilih harus disesuaikan dengan ketersediaan platform, waktu praktikum, dan kemampuan komputasi.

Prinsip pemilihan metode:

1. Gunakan metode yang sama untuk semua molekul jika tujuan praktikum adalah perbandingan.
2. Catat metode dan basis set secara jelas.
3. Hindari membandingkan frekuensi dari metode berbeda tanpa alasan.
4. Gunakan basis set yang cukup sederhana untuk praktikum, tetapi tetap bermakna.
5. Terapkan faktor skala jika diperlukan dan jika diberikan oleh instruktur.

Contoh kombinasi yang sering digunakan dalam praktikum:

HF/STO-3G
 HF/6-31G
 B3LYP/6-31G(d)
 B3LYP/6-31G*

Pilihan metode akan memengaruhi frekuensi. Frekuensi harmonik dari metode tertentu sering memiliki galat sistematis. Karena itu, faktor skala sering diperlukan. Mahasiswa tidak boleh menganggap nilai frekuensi komputasi sebagai angka absolut tanpa koreksi atau tanpa mempertimbangkan metode.

Pernyataan laporan yang baik:

Optimasi geometri dan perhitungan frekuensi dilakukan menggunakan metode yang sama untuk semua molekul agar hasil frekuensi dapat dibandingkan secara konsisten. Metode dan basis set dicatat pada tabel hasil.

Jika mahasiswa menggunakan metode berbeda untuk molekul berbeda, perbandingan menjadi kurang kuat karena perbedaan hasil dapat berasal dari metode, bukan dari struktur molekul.

5. Jenis Job: Optimasi Geometri dan Frekuensi

Dalam Praktikum 6, jenis job utama adalah **optimasi geometri** dan **frekuensi**. Idealnya, mahasiswa menjalankan keduanya secara berurutan. Struktur awal dioptimasi terlebih dahulu, kemudian struktur hasil optimasi digunakan untuk perhitungan frekuensi.

Alur job:

Opt
 → memperoleh geometri minimum

Freq

→ menghitung frekuensi dan intensitas IR pada geometri minimum

Jika platform mendukung job gabungan, mahasiswa dapat memilih job seperti:

Opt + Freq

Namun, mahasiswa tetap harus memeriksa apakah optimasi selesai normal sebelum membaca frekuensi. Job gabungan yang gagal optimasi tetapi tetap menghasilkan bagian output tertentu tidak boleh langsung ditafsirkan sebagai hasil frekuensi yang valid.

Status yang perlu diperiksa:

Tahap	Hal yang Diperiksa
Optimasi geometri	Apakah konvergen?
Frekuensi	Apakah semua frekuensi nyata?
Output	Apakah intensitas IR tersedia?
Struktur akhir	Apakah geometri masuk akal?

Jika optimasi tidak konvergen, langkah yang dapat dilakukan adalah memperbaiki struktur awal, mengganti metode, memperbesar batas iterasi jika tersedia, atau menjalankan optimasi ulang.

6. Langkah Umum Menjalankan Jalur ChemCompute

Langkah umum penggunaan ChemCompute dalam Praktikum 6 dapat disusun sebagai berikut:

1. Siapkan struktur molekul.
2. Masuk ke platform ChemCompute.
3. Pilih atau unggah struktur molekul.
4. Pilih paket komputasi yang tersedia.
5. Pilih jenis job: optimasi geometri dan frekuensi.
6. Tentukan metode dan basis set.
7. Atur muatan total dan multiplicity.
8. Jalankan perhitungan.
9. Tunggu job selesai.
10. Buka output hasil perhitungan.
11. Periksa status optimasi.
12. Periksa daftar frekuensi.
13. Pastikan tidak ada frekuensi imajiner untuk molekul stabil.
14. Catat frekuensi dan intensitas IR.
15. Unduh output.
16. Simpan output dengan nama yang rapi.
17. Masukkan data frekuensi dan intensitas ke tabel praktikum.

Langkah-langkah tersebut harus diikuti dengan disiplin. Kesalahan kecil pada tahap awal dapat menghasilkan kesalahan besar pada output. Misalnya, jika multiplicity salah, hasil frekuensi tidak

menggambarkan molekul yang dimaksud. Jika struktur awal etanol tidak benar, spektrum etanol tidak akan sesuai dengan gugus fungsi yang seharusnya.

7. Output yang Harus Diunduh dari ChemCompute

Setelah perhitungan selesai, mahasiswa harus mengunduh atau menyimpan output. Output ini menjadi bukti perhitungan dan sumber data untuk analisis. Jangan hanya menyalin beberapa angka ke laporan tanpa menyimpan file output.

Output yang harus diperoleh:

1. File output komputasi lengkap.
2. Geometri akhir hasil optimasi.
3. Daftar frekuensi vibrasi.
4. Daftar intensitas IR.
5. Informasi metode dan basis set.
6. Informasi muatan dan multiplicity.
7. Status optimasi.
8. Informasi frekuensi imajiner jika ada.
9. Data mode normal jika tersedia.

Nama file output yang dianjurkan:

```
h2o_freq_output.log
co2_freq_output.log
nh3_freq_output.log
formaldehida_freq_output.log
etanol_freq_output.log
aseton_freq_output.log
```

Jika platform menghasilkan format berbeda, seperti .out, .log, atau .txt, mahasiswa dapat menyesuaikan, tetapi nama file harus tetap informatif.

Contoh struktur folder:

```
output_chemcompute/
├── h2o_freq_output.log
├── co2_freq_output.log
├── nh3_freq_output.log
├── formaldehida_freq_output.log
├── etanol_freq_output.log
└── aseton_freq_output.log
```

Penyimpanan output yang rapi membantu mahasiswa saat menyusun laporan, membuat tabel, dan membandingkan data dengan hasil Python.

8. Membaca Frekuensi Vibrasi dari Output

Bagian utama output yang harus dibaca adalah daftar frekuensi vibrasi. Frekuensi biasanya ditampilkan dalam satuan cm^{-1} . Mahasiswa harus mencatat semua frekuensi yang relevan, terutama frekuensi dengan intensitas IR signifikan.

Format tabel awal:

Molekul	Mode ke-	Frekuensi Komputasi (cm^{-1})	Intensitas IR	Catatan Mode
H ₂ O	1	...	...	bending
H ₂ O	2	...	...	O–H stretch
H ₂ O	3	...	...	O–H stretch
CO ₂	1	...	...	bending
CO ₂	2	...	...	stretching
...	...	...	...	...

Untuk molekul kecil, semua mode dapat dicatat. Untuk molekul yang lebih besar seperti etanol dan aseton, semua frekuensi tetap sebaiknya disimpan dalam CSV, tetapi laporan dapat menyoroti puncak utama.

Mahasiswa harus memahami bahwa frekuensi yang sangat rendah dapat berkaitan dengan gerak torsional atau mode lunak, terutama pada molekul fleksibel seperti etanol. Pada molekul organik fleksibel, beberapa mode rendah dapat muncul karena rotasi internal atau deformasi rangka.

9. Membaca Intensitas IR dari Output

Selain frekuensi, mahasiswa harus membaca **intensitas IR**. Intensitas menunjukkan kuat lemahnya serapan IR. Mode dengan intensitas tinggi biasanya lebih menonjol dalam spektrum simulasi.

Intensitas IR dalam output dapat dinyatakan dalam satuan tertentu, misalnya km/mol , atau sebagai intensitas relatif bergantung software. Mahasiswa harus mencatat satuan sesuai output.

Tabel data yang baik:

Molekul	Frekuensi (cm^{-1})	Intensitas IR	Penugasan Awal
Aseton	...	...	C=O stretch
Etanol	...	...	O–H stretch
Etanol	...	...	C–O stretch
Formaldehida	...	...	C=O stretch

Intensitas tidak boleh ditafsirkan secara terpisah dari mode normal. Puncak kuat perlu diperiksa apakah benar berkaitan dengan perubahan momen dipol yang besar. Misalnya, regangan C=O sering kuat karena vibrasi karbonil menyebabkan perubahan momen dipol yang signifikan.

10. Pemeriksaan Frekuensi Imajiner

Setelah daftar frekuensi diperoleh, mahasiswa harus memeriksa apakah ada frekuensi imajiner. Dalam banyak output, frekuensi imajiner ditampilkan sebagai angka negatif. Dalam beberapa software, dapat diberi tanda khusus. Untuk molekul stabil dalam Praktikum 6, frekuensi imajiner seharusnya tidak ada.

Prinsip validasi:

tidak ada frekuensi imajiner
→ struktur dapat dianalisis sebagai minimum lokal

ada frekuensi imajiner
→ struktur perlu diperiksa ulang

Tabel validasi:

Molekul	Frekuensi Imajiner	Status
H ₂ O	Tidak ada	Valid
CO ₂	Tidak ada	Valid
NH ₃	Tidak ada	Valid
Formaldehida	Tidak ada	Valid
Etanol	Tidak ada	Valid
Aseton	Tidak ada	Valid

Jika terdapat frekuensi imajiner pada etanol, misalnya, mahasiswa harus memeriksa apakah konformasi etanol belum mencapai minimum atau apakah optimasi belum konvergen. Jika terdapat frekuensi imajiner pada H₂O atau CO₂, kemungkinan ada kesalahan serius pada struktur atau perhitungan.

Contoh catatan laporan:

Tidak ditemukan frekuensi imajiner pada output frekuensi H₂O, sehingga struktur hasil optimasi dapat dianggap sebagai minimum lokal pada tingkat teori yang digunakan.

Jika ada frekuensi imajiner:

Output menunjukkan frekuensi imajiner pada etanol. Oleh karena itu, struktur belum dapat dianggap sebagai minimum lokal dan perlu dilakukan optimasi ulang sebelum spektrum IR ditafsirkan.

11. Membaca Mode Normal

Frekuensi dan intensitas memberikan angka, tetapi mode normal memberikan makna gerak. Jika ChemCompute atau output yang diunduh dapat dibuka dengan visualizer, mahasiswa sebaiknya melihat animasi mode normal. Mode normal membantu menentukan apakah suatu frekuensi berkaitan dengan O–H stretch, N–H stretch, C=O stretch, C–O stretch, C–H stretch, bending, atau mode kolektif lainnya.

Contoh penugasan:

Molekul	Frekuensi	Mode Normal Dominan
H ₂ O	tinggi	O–H stretching
H ₂ O	lebih rendah	H–O–H bending
NH ₃	tinggi	N–H stretching
Formaldehida	daerah karbonil	C=O stretching
Etanol	tinggi	O–H stretching
Etanol	menengah	C–O stretching
Aseton	daerah karbonil	C=O stretching

Penugasan mode tidak boleh hanya berdasarkan tabel daerah IR. Pada molekul besar, suatu mode dapat bercampur. Misalnya, mode pada etanol dapat melibatkan gerakan C–O sekaligus deformasi rangka. Karena itu, visualisasi mode normal sangat dianjurkan jika tersedia.

12. Penerapan Faktor Skala Setelah Data Diunduh

Frekuensi yang diperoleh dari ChemCompute umumnya adalah frekuensi harmonik komputasi. Frekuensi ini sering perlu dikoreksi dengan faktor skala. Faktor skala diterapkan bukan di ChemCompute, tetapi pada tahap analisis data, misalnya dengan Python.

Rumus:

frekuensi terkoreksi = faktor skala × frekuensi komputasi

Contoh:

frekuensi C=O komputasi = 1800 cm⁻¹
faktor skala = 0,96

frekuensi terkoreksi = 1728 cm⁻¹

Dalam jalur ChemCompute, mahasiswa cukup mengunduh frekuensi komputasi asli. Koreksi faktor skala dapat dilakukan pada subbab 9.6 melalui Python. Namun, mahasiswa harus mencatat metode dan basis set karena faktor skala bergantung pada tingkat teori.

Mahasiswa tidak boleh menghapus data asli setelah menerapkan faktor skala. Data asli dan data terkoreksi harus disimpan berdampingan.

Format tabel yang dianjurkan:

Molekul	Frekuensi (cm ⁻¹)	Komputasi	Faktor Skala	Frekuensi (cm ⁻¹)	Terkoreksi	Intensitas IR
Aseton	...		0,96	...		...

Dengan format seperti ini, pembaca laporan dapat melihat proses koreksi secara transparan.

13. Contoh Jalur ChemCompute untuk H₂O

H₂O menjadi contoh paling sederhana untuk jalur ChemCompute. Langkah yang dilakukan:

1. Buat struktur H₂O.
2. Atur muatan 0 dan multiplicity 1.
3. Pilih metode dan basis set.
4. Jalankan optimasi geometri.
5. Jalankan perhitungan frekuensi.
6. Periksa tidak ada frekuensi imajiner.
7. Catat tiga mode vibrasi.
8. Unduh output.

Analisis yang diharapkan:

H₂O memiliki tiga mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan tiga atom. Output ChemCompute seharusnya menunjukkan tiga frekuensi vibrasi utama, yaitu mode bending H-O-H dan dua mode stretching O-H. Mode stretching O-H muncul pada frekuensi lebih tinggi daripada bending karena regangan ikatan memerlukan energi lebih besar daripada perubahan sudut.

H₂O cocok digunakan untuk melatih mahasiswa membaca jumlah mode vibrasi dan membedakan stretching serta bending.

14. Contoh Jalur ChemCompute untuk CO₂

CO₂ digunakan untuk memahami molekul linear dan aktivitas IR. Langkah yang dilakukan:

1. Buat struktur O=C=O linear.
2. Atur muatan 0 dan multiplicity 1.
3. Jalankan optimasi geometri.
4. Jalankan perhitungan frekuensi.
5. Periksa jumlah mode vibrasi.
6. Catat mode stretching dan bending.

7. Periksa intensitas IR.
8. Unduh output.

Analisis yang diharapkan:

CO₂ merupakan molekul linear dengan tiga atom sehingga memiliki empat mode vibrasi. Meskipun CO₂ nonpolar pada keadaan setimbang, beberapa mode vibrasinya dapat aktif IR karena menghasilkan perubahan momen dipol selama vibrasi. Output ChemCompute perlu diperiksa untuk melihat frekuensi dan intensitas IR dari mode-mode tersebut.

CO₂ juga penting untuk mengajarkan bahwa molekul linear menggunakan rumus $3N - 5$, bukan $3N - 6$.

15. Contoh Jalur ChemCompute untuk Formaldehida dan Aseton

Formaldehida dan aseton digunakan untuk mempelajari puncak karbonil C=O. Langkah umum:

1. Bangun struktur karbonil dengan benar.
2. Pastikan ikatan C=O benar.
3. Atur muatan 0 dan multiplicity 1.
4. Jalankan optimasi geometri.
5. Jalankan frekuensi.
6. Periksa frekuensi imajiner.
7. Cari mode C=O stretching.
8. Catat frekuensi dan intensitas IR.
9. Unduh output.

Analisis formaldehida:

Formaldehida memiliki gugus C=O dan dua ikatan C-H. Output frekuensi diharapkan memuat mode regangan C=O yang cukup kuat karena perubahan panjang ikatan karbonil menghasilkan perubahan momen dipol yang signifikan.

Analisis aseton:

Aseton memiliki gugus C=O keton dan dua gugus metil. Mode regangan C=O biasanya menjadi salah satu puncak utama dalam spektrum IR karena intensitasnya kuat. Selain itu, gugus metil menghasilkan beberapa mode C-H stretching dan bending.

Perbandingan formaldehida dan aseton membantu mahasiswa memahami bahwa lingkungan kimia dapat memengaruhi posisi puncak C=O.

16. Contoh Jalur ChemCompute untuk Etanol

Etanol digunakan sebagai model alkohol sederhana. Langkah umum:

1. Bangun struktur $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$.
2. Pastikan gugus O-H lengkap.
3. Pastikan semua atom H terpasang.
4. Pilih konformasi awal yang wajar.
5. Jalankan optimasi geometri.
6. Jalankan perhitungan frekuensi.
7. Periksa frekuensi imajiner.
8. Catat mode O-H, C-H, dan C-O.
9. Unduh output.

Etanol memiliki 21 mode vibrasi, sehingga output lebih panjang daripada molekul kecil. Mahasiswa tidak harus membahas semua mode secara rinci dalam laporan, tetapi semua data sebaiknya disimpan. Puncak utama yang perlu diperhatikan adalah O-H, C-H, dan C-O.

Analisis yang diharapkan:

Etanol memiliki mode O-H stretching pada frekuensi tinggi, mode C-H stretching pada daerah regangan C-H, serta mode C-O stretching pada daerah lebih rendah. Karena etanol memiliki 21 mode vibrasi, spektrumnya lebih kompleks daripada molekul kecil seperti H_2O atau CO_2 .

Etanol juga perlu ditafsirkan hati-hati karena spektrum komputasi molekul tunggal tidak selalu sama dengan spektrum eksperimen cairan, terutama pada puncak O-H yang dipengaruhi ikatan hidrogen.

17. Tabel Rekap Data ChemCompute

Setelah semua molekul dihitung, mahasiswa perlu menyusun tabel rekap. Tabel ini menjadi dasar untuk analisis Python dan laporan.

Format tabel rekap:

Molekul	Metode	Basis Set	Jumlah Mode	Frekuensi Imajiner	Puncak Utama (cm^{-1})	Intensitas Utama	Catatan
H_2O	...	...	3	Tidak ada	...	...	O-H stretch
CO_2	...	...	4	Tidak ada	...	...	mode CO_2
NH_3	...	...	6	Tidak ada	...	...	N-H stretch
Formaldehida	...	...	6	Tidak ada	...	...	C=O stretch
Etanol	...	...	21	Tidak ada	...	...	O-H, C-O
Aseton	...	...	24	Tidak ada	...	...	C=O stretch

Selain tabel rekap, mahasiswa sebaiknya membuat tabel lengkap frekuensi dan intensitas untuk setiap molekul. Tabel lengkap tersebut dapat disimpan sebagai CSV pada tahap Python.

18. Validasi Hasil ChemCompute

Validasi hasil ChemCompute sangat penting sebelum data digunakan. Validasi dilakukan untuk memastikan bahwa output dapat dipercaya secara kimia dan komputasi.

Daftar validasi:

```
[ ] Struktur molekul benar.
[ ] Muatan total benar.
[ ] Multiplicity benar.
[ ] Metode dan basis set tercatat.
[ ] Optimasi geometri selesai normal.
[ ] Perhitungan frekuensi selesai.
[ ] Tidak ada frekuensi imajiner untuk molekul stabil.
[ ] Jumlah mode vibrasi sesuai rumus.
[ ] Frekuensi dan intensitas IR tersedia.
[ ] Output telah diunduh dan disimpan.
[ ] Data siap diproses dengan Python.
```

Jika salah satu poin tidak terpenuhi, mahasiswa harus memperbaiki perhitungan sebelum melanjutkan. Misalnya, jika jumlah mode vibrasi H₂O bukan 3 atau CO₂ bukan 4, mahasiswa harus memeriksa apakah output dibaca dengan benar.

19. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Dampak
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Laporan metodologis tidak tepat
Tidak mencatat paket komputasi	Hasil sulit direproduksi
Tidak mencatat metode dan basis set	Perbandingan tidak valid
Tidak mengoptimasi sebelum frekuensi	Frekuensi tidak dapat dipercaya
Mengabaikan frekuensi imajiner	Struktur tidak minimum tetap dianalisis
Salah memasukkan muatan	Distribusi elektron salah
Salah memasukkan multiplicity	Keadaan elektronik tidak sesuai
Struktur awal tidak lengkap	Optimasi dan frekuensi salah
Tidak menyimpan output	Data tidak dapat diverifikasi
Menafsirkan semua puncak hanya dari angka	Penugasan mode berisiko salah

Kesalahan-kesalahan ini dapat mengurangi kualitas praktikum. Karena itu, mahasiswa harus memperlakukan output ChemCompute sebagai data ilmiah yang perlu divalidasi, bukan sekadar hasil otomatis.

20. Keterbatasan Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki banyak kelebihan, terutama kemudahan akses. Namun, ada beberapa keterbatasan.

Pertama, pilihan metode dan basis set mungkin terbatas bergantung platform. Mahasiswa harus menggunakan opsi yang tersedia dan mencatatnya dengan jelas.

Kedua, waktu komputasi dapat bergantung pada server dan ukuran molekul. Molekul kecil biasanya cepat, tetapi molekul lebih besar seperti etanol dan aseton dapat membutuhkan waktu lebih lama.

Ketiga, antarmuka web dapat menyembunyikan detail tertentu. Karena itu, mahasiswa harus tetap membaca output, bukan hanya melihat ringkasan.

Keempat, visualisasi mode normal mungkin terbatas. Jika ChemCompute tidak menyediakan animasi mode normal yang cukup jelas, mahasiswa dapat mengunduh output dan membukanya dengan Molden, GaussView, atau visualizer lain yang sesuai.

Kelima, hasil frekuensi harmonik belum tentu cocok langsung dengan eksperimen. Faktor skala tetap perlu diterapkan pada tahap analisis.

Keenam, ChemCompute memerlukan koneksi internet dan ketersediaan layanan. Jika server bermasalah, mahasiswa perlu memiliki alternatif seperti ORCA, GAMESS, atau Gaussian lokal jika tersedia.

Dengan memahami keterbatasan tersebut, mahasiswa dapat menggunakan ChemCompute secara realistis dan kritis.

21. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki implikasi pedagogis yang kuat. Pertama, jalur ini mempermudah mahasiswa masuk ke praktik kimia komputasi tanpa hambatan instalasi. Kedua, jalur ini memungkinkan mahasiswa fokus pada konsep frekuensi vibrasi, mode normal, dan spektrum IR. Ketiga, jalur ini mengajarkan bahwa hasil komputasi harus divalidasi melalui status optimasi dan frekuensi imajiner. Keempat, jalur ini menghubungkan teori osilator harmonik dengan output nyata berupa frekuensi dan intensitas IR.

Namun, jalur ini juga menuntut sikap kritis. Kemudahan antarmuka web tidak boleh membuat mahasiswa menjadi pengguna pasif. Mahasiswa harus tetap memahami:

apa yang dihitung,
dengan metode apa,
pada struktur apa,
dengan basis set apa,
apakah struktur valid,
apakah ada frekuensi imajiner,
dan bagaimana hasil ditafsirkan.

Dengan sikap seperti ini, ChemCompute menjadi alat pembelajaran yang kuat, bukan sekadar mesin penghasil angka.

22. Transisi ke Jalur Python Mandiri

Subbab 9.5 telah membahas jalur ChemCompute untuk Praktikum 6. Mahasiswa menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi untuk H₂O, CO₂, NH₃, formaldehida, etanol, dan aseton. Dari jalur ini, mahasiswa memperoleh output vibrasi yang memuat frekuensi, intensitas IR, informasi mode normal, dan validasi ada tidaknya frekuensi imajiner. Output tersebut harus diunduh, disimpan, dan disusun sebagai data awal.

Subbab berikutnya akan membahas jalur Python mandiri. Pada subbab 9.6, mahasiswa akan menggunakan daftar frekuensi dan intensitas IR untuk membuat spektrum IR simulasi, menerapkan faktor skala, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan spektrum dua molekul, serta menyimpan hasil analisis dalam CSV. Dengan demikian, data dari ChemCompute akan diubah menjadi grafik spektrum dan tabel analisis yang siap digunakan dalam laporan praktikum.

9.6 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri dalam Praktikum 6 digunakan untuk mengolah data frekuensi vibrasi dan intensitas IR yang diperoleh dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau sumber output komputasi lain. Jika jalur ChemCompute pada subbab 9.5 menghasilkan data komputasi berupa daftar frekuensi dan intensitas IR, maka jalur Python mandiri mengubah data tersebut menjadi **spektrum IR simulasi, tabel frekuensi terkoreksi, daftar puncak utama, perbandingan spektrum dua molekul, dan file CSV hasil analisis.**

Dengan demikian, Python dalam Praktikum 6 bukan digunakan untuk menghitung frekuensi vibrasi dari awal. Python tidak menggantikan perhitungan Hessian, mode normal, atau intensitas IR yang dilakukan oleh paket kimia kuantum. Python digunakan sebagai alat analisis data. Perannya adalah membaca daftar frekuensi dan intensitas, menerapkan faktor skala, membentuk kurva spektrum, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan molekul, dan menyimpan data secara rapi.

Kode Python pada Praktikum 6 wajib memuat enam komponen utama:

1. **Input daftar frekuensi vibrasi.**
2. **Input intensitas IR.**
3. **Pembuatan spektrum IR simulasi.**
4. **Penerapan faktor skala.**
5. **Identifikasi puncak utama.**
6. **Perbandingan spektrum dua molekul.**

Keenam komponen ini menunjukkan bahwa jalur Python mandiri tidak hanya berfungsi sebagai alat menggambar grafik. Jalur ini melatih mahasiswa membaca output komputasi secara sistematis, memahami hubungan antara frekuensi dan intensitas, membedakan frekuensi komputasi dan frekuensi terkoreksi, serta membandingkan spektrum berdasarkan gugus fungsi.

1. Kedudukan Python dalam Praktikum 6

Python memiliki kedudukan sebagai alat pengolah hasil komputasi. Data awal berasal dari output frekuensi. Data tersebut biasanya berbentuk daftar diskrit:

```
frekuensi_1, intensitas_1
frekuensi_2, intensitas_2
frekuensi_3, intensitas_3
...
```

Daftar tersebut belum berbentuk spektrum halus seperti grafik IR yang biasa dijumpai dalam buku spektroskopi atau hasil instrumen. Karena itu, Python digunakan untuk membentuk kurva spektrum simulasi melalui fungsi pelebaran puncak, misalnya fungsi Gaussian.

Alur kerja Python dalam Praktikum 6 dapat digambarkan sebagai berikut:

```
output frekuensi komputasi
→ daftar frekuensi dan intensitas IR
→ penerapan faktor skala
→ pembentukan spektrum simulasi
→ identifikasi puncak utama
→ perbandingan dua molekul
→ penyimpanan CSV dan grafik
```

Alur tersebut penting karena memperlihatkan hubungan antara data numerik dan representasi spektrum. Mahasiswa belajar bahwa spektrum IR simulasi bukan gambar yang muncul begitu saja, tetapi dibangun dari puncak-puncak diskrit yang masing-masing memiliki frekuensi dan intensitas.

2. Data Input: Frekuensi Vibrasi dan Intensitas IR

Data input utama jalur Python adalah daftar frekuensi vibrasi dan intensitas IR. Frekuensi biasanya dinyatakan dalam satuan cm^{-1} , sedangkan intensitas IR dapat dinyatakan dalam km/mol , intensitas relatif, atau satuan lain bergantung output software.

Format data minimum adalah:

Molekul	Mode ke-	Frekuensi Komputasi (cm^{-1})	Intensitas IR
H ₂ O	1	...	...
H ₂ O	2	...	...
H ₂ O	3	...	...
CO ₂	1	...	...
CO ₂	2	...	...
...	...	...	...

Dalam praktikum, mahasiswa dapat memasukkan data dengan dua cara. Pertama, data dapat ditulis langsung di dalam kode Python sebagai dictionary. Cara ini sederhana dan cocok untuk latihan awal. Kedua, data dapat dibaca dari file CSV. Cara kedua lebih baik untuk pekerjaan yang lebih rapi karena data dapat diperbarui tanpa mengubah struktur kode.

Contoh input sederhana dalam kode:

```
data_ir = {
    "Etanol": {
        "frekuensi": [3650, 2980, 2930, 1450, 1250, 1080],
        "intensitas": [80, 25, 20, 15, 30, 70],
    },
    "Aseton": {
        "frekuensi": [3050, 2960, 1715, 1450, 1360, 1220],
        "intensitas": [15, 20, 280, 35, 25, 80],
    },
}
```

Data tersebut hanya contoh latihan. Dalam laporan final, mahasiswa harus mengganti data tersebut dengan frekuensi dan intensitas yang benar-benar diperoleh dari output ChemCompute atau software komputasi yang digunakan.

3. Frekuensi Komputasi dan Frekuensi Terkoreksi

Frekuensi yang dihasilkan oleh perhitungan kimia komputasi umumnya merupakan frekuensi harmonik. Karena pendekatan harmonik sering menghasilkan frekuensi yang sedikit berbeda dari nilai eksperimen, frekuensi komputasi sering dikoreksi menggunakan faktor skala.

Rumus faktor skala:

```
frekuensi terkoreksi = faktor skala × frekuensi komputasi
```

Contoh:

```
frekuensi komputasi = 1800 cm-1
faktor skala = 0,96
```

```
frekuensi terkoreksi = 0,96 × 1800
                     = 1728 cm-1
```

Dalam jalur Python, faktor skala diterapkan secara otomatis pada semua frekuensi. Data asli tetap disimpan agar mahasiswa dapat membedakan frekuensi komputasi dan frekuensi terkoreksi.

Tabel yang baik memuat dua kolom frekuensi:

Molekul	Mode	Frekuensi Komputasi (cm ⁻¹)	Faktor Skala	Frekuensi Terkoreksi (cm ⁻¹)	Intensitas IR
Aseton	1	...	0,96	...	...

Dengan format ini, proses koreksi menjadi transparan. Mahasiswa tidak boleh hanya menampilkan frekuensi terkoreksi tanpa menyebut frekuensi komputasi asli dan faktor skala yang digunakan.

4. Spektrum IR Simulasi

Output perhitungan frekuensi biasanya berupa garis-garis diskrit. Agar tampak seperti spektrum IR, setiap frekuensi dapat diperlebar menggunakan fungsi Gaussian atau Lorentzian. Dalam Praktikum 6, fungsi Gaussian cukup digunakan karena mudah dipahami dan mudah diterapkan dalam Python.

Bentuk umum fungsi Gaussian untuk satu puncak adalah:

$$I(\nu) = I_0 \exp[-(\nu - \nu_0)^2 / (2\sigma^2)]$$

dengan:

$I(\nu)$ = intensitas pada bilangan gelombang ν
 I_0 = intensitas puncak
 ν_0 = posisi frekuensi puncak
 σ = parameter lebar puncak

Jika terdapat banyak puncak, spektrum total adalah penjumlahan semua puncak:

$$I_{\text{total}}(\nu) = \sum I_i \exp[-(\nu - \nu_i)^2 / (2\sigma^2)]$$

Parameter σ menentukan lebar puncak. Jika σ terlalu kecil, spektrum tampak sebagai garis-garis tajam. Jika σ terlalu besar, puncak-puncak dapat saling menyatu. Dalam praktikum, nilai σ dapat ditentukan oleh dosen, misalnya 15–30 cm⁻¹, tergantung kebutuhan visualisasi.

Spektrum IR biasanya ditampilkan dengan sumbu bilangan gelombang menurun dari kiri ke kanan, yaitu dari 4000 ke 400 cm^{-1} . Konvensi ini mengikuti kebiasaan penyajian spektrum IR dalam spektroskopi.

5. Identifikasi Puncak Utama

Identifikasi puncak utama dilakukan dengan melihat frekuensi dan intensitas. Puncak utama dapat dipilih berdasarkan intensitas tertinggi atau berdasarkan relevansi gugus fungsi. Dalam Praktikum 6, puncak utama yang perlu diperhatikan adalah puncak yang berkaitan dengan:

1. O–H
2. N–H
3. C–H
4. C=O
5. C–O

Python dapat membantu mengurutkan puncak berdasarkan intensitas. Namun, keputusan akhir penugasan puncak tetap memerlukan pemahaman kimia dan, jika tersedia, visualisasi mode normal.

Contoh:

Aseton

- puncak kuat sekitar daerah karbonil
- kemungkinan besar C=O stretch

Etanol

- puncak tinggi pada daerah O–H
- kemungkinan O–H stretch

Etanol

- puncak pada daerah C–O
- kemungkinan C–O stretch

Mahasiswa harus berhati-hati karena pada molekul organik satu mode normal dapat melibatkan banyak gerakan sekaligus. Oleh sebab itu, hasil identifikasi Python sebaiknya disebut sebagai “penugasan awal” sampai diperiksa dengan animasi mode normal.

6. Perbandingan Spektrum Dua Molekul

Salah satu kemampuan penting dalam Praktikum 6 adalah membandingkan spektrum dua molekul. Perbandingan ini dapat dilakukan dengan menampilkan dua spektrum pada satu grafik atau membuat grafik terpisah dengan skala yang sama.

Contoh perbandingan yang penting:

Molekul yang Dibandingkan	Fokus Perbandingan
H ₂ O dan NH ₃	O–H versus N–H
H ₂ O dan CO ₂	Molekul bengkok versus linear
Formaldehida dan aseton	Puncak C=O dalam lingkungan berbeda
Etanol dan aseton	Alkohol versus keton
Etanol dan formaldehida	O–H/C–O versus C=O

Perbandingan etanol dan aseton sangat baik untuk memperlihatkan perbedaan gugus fungsi. Etanol memiliki O–H dan C–O, sedangkan aseton memiliki C=O. Jika spektrum keduanya dibandingkan, mahasiswa dapat melihat bahwa puncak khas alkohol dan keton muncul pada daerah yang berbeda.

Secara konseptual:

Etanol
→ O–H dan C–O

Aseton
→ C=O

Perbandingan spektrum
→ membedakan alkohol dan keton

Perbandingan ini menegaskan bahwa spektrum IR dapat digunakan sebagai alat identifikasi struktur.

7. Struktur Kode Python yang Dianjurkan

Kode Python Praktikum 6 sebaiknya disusun secara modular. Struktur yang dianjurkan adalah:

1. Impor pustaka
2. Definisi data frekuensi dan intensitas
3. Definisi faktor skala
4. Fungsi menerapkan faktor skala
5. Fungsi membuat spektrum Gaussian
6. Fungsi mengidentifikasi puncak utama
7. Fungsi membuat tabel hasil
8. Fungsi membandingkan spektrum dua molekul
9. Fungsi menyimpan CSV
10. Fungsi menyimpan grafik

Struktur modular penting karena membuat kode lebih mudah dibaca, diperbaiki, dan digunakan ulang. Kode yang baik bukan hanya kode yang dapat berjalan, tetapi juga kode yang mudah dipahami oleh mahasiswa lain, dosen, atau pembaca laporan.

8. Contoh Kode Python Jalur Mandiri

Kode berikut adalah contoh kerangka lengkap untuk jalur Python mandiri Praktikum 6. Data frekuensi dan intensitas di dalam kode bersifat **contoh latihan**. Mahasiswa harus mengganti data tersebut dengan hasil dari ChemCompute atau output software komputasi yang digunakan.

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path

# =====
# PRAKTIKUM 6: FREKUENSI VIBRASI DAN SPEKTRUM IR KOMPUTASI
# Jalur Python Mandiri
# =====

# Catatan:
# Data frekuensi dan intensitas di bawah adalah contoh latihan.
# Untuk laporan final, ganti dengan data dari output ChemCompute,
# GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software komputasi lain.

# -----
# 1. Parameter umum
# -----

FAKTOR_SKALA = 0.96
SIGMA = 25.0
X_MIN = 400
X_MAX = 4000
JUMLAH_TITIK = 5000

output_dir = Path("output_praktikum_06")
output_dir.mkdir(exist_ok=True)

# -----
# 2. Data frekuensi dan intensitas IR
# -----
# frekuensi dalam cm-1
# intensitas dalam satuan relatif atau mengikuti output software

data_ir = {
    "H2O": {
        "nama": "H2O",
        "frekuensi": [1600, 3650, 3750],
        "intensitas": [70, 95, 90],
    },
    "CO2": {
        "nama": "CO2",
        "frekuensi": [667, 667, 1388, 2349],
        "intensitas": [80, 80, 0, 250],
    },
    "NH3": {
        "nama": "NH3",
        "frekuensi": [950, 1620, 1620, 3330, 3440, 3440],
        "intensitas": [30, 60, 60, 80, 90, 90],
    },
}
```

```

    },
    "Formaldehida": {
        "nama": "Formaldehida",
        "frekuensi": [1160, 1250, 1500, 1740, 2850, 2950],
        "intensitas": [35, 45, 25, 220, 50, 55],
    },
    "Etanol": {
        "nama": "Etanol",
        "frekuensi": [1080, 1250, 1450, 2930, 2980, 3650],
        "intensitas": [70, 30, 15, 20, 25, 80],
    },
    "Aseton": {
        "nama": "Aseton",
        "frekuensi": [1220, 1360, 1450, 1715, 2960, 3050],
        "intensitas": [80, 25, 35, 280, 20, 15],
    },
}

# -----
# 3. Fungsi menerapkan faktor skala
# -----

def terapkan_faktor_skala(frekuensi, faktor_skala=FAKTOR_SKALA):
    frekuensi = np.array(frekuensi, dtype=float)
    return frekuensi * faktor_skala

# -----
# 4. Fungsi membuat spektrum Gaussian
# -----

def buat_spektrum(frekuensi, intensitas, x_grid, sigma=SIGMA):
    frekuensi = np.array(frekuensi, dtype=float)
    intensitas = np.array(intensitas, dtype=float)

    y = np.zeros_like(x_grid, dtype=float)

    for f, inten in zip(frekuensi, intensitas):
        y += inten * np.exp(-(x_grid - f) ** 2) / (2 * sigma ** 2))

    return y

# -----
# 5. Fungsi identifikasi puncak utama
# -----

def identifikasi_puncak_utama(frekuensi, intensitas, jumlah_puncak=5):
    df = pd.DataFrame({
        "frekuensi_cm-1": frekuensi,
        "intensitas_IR": intensitas,
    })

    df = df.sort_values(by="intensitas_IR", ascending=False)
    df = df.head(jumlah_puncak)
    df = df.sort_values(by="frekuensi_cm-1", ascending=False)

    return df.reset_index(drop=True)

```

```

# -----
# 6. Fungsi penugasan awal daerah IR
# -----

def penugasan_awal(frekuensi):
    if 3200 <= frekuensi <= 3700:
        return "O-H/N-H stretch atau X-H stretch frekuensi tinggi"
    if 2800 <= frekuensi <= 3100:
        return "C-H stretch"
    if 1650 <= frekuensi <= 1800:
        return "C=O stretch"
    if 1000 <= frekuensi <= 1300:
        return "C-O stretch atau mode fingerprint"
    if frekuensi < 1500:
        return "Bending atau fingerprint region"
    return "Mode vibrasi lain"

# -----
# 7. Membuat tabel frekuensi, intensitas, dan faktor skala
# -----

semua_baris = []
daftar_puncak = []

x_grid = np.linspace(X_MIN, X_MAX, JUMLAH_TITIK)

for kode, data in data_ir.items():
    nama = data["nama"]
    frek_asli = np.array(data["frekuensi"], dtype=float)
    intensitas = np.array(data["intensitas"], dtype=float)
    frek_skala = terapkan_faktor_skala(frek_asli)

    for i, (f0, fs, inten) in enumerate(zip(frek_asli, frek_skala, intensitas),
start=1):
        semua_baris.append({
            "kode_molekul": kode,
            "nama_molekul": nama,
            "mode_ke": i,
            "frekuensi_komputasi_cm-1": f0,
            "faktor_skala": FAKTOR_SKALA,
            "frekuensi_terkoreksi_cm-1": fs,
            "intensitas_IR": inten,
            "penugasan_awal": penugasan_awal(fs),
        })

    puncak = identifikasi_puncak_utama(frek_skala, intensitas,
jumlah_puncak=4)
    puncak["kode_molekul"] = kode
    puncak["nama_molekul"] = nama
    puncak["penugasan_awal"] = puncak["frekuensi_cm-1"].apply(penugasan_awal)
    daftar_puncak.append(puncak)

df_tabel = pd.DataFrame(semua_baris)
df_puncak = pd.concat(daftar_puncak, ignore_index=True)

# Simpan tabel hasil
df_tabel.to_csv(output_dir / "tabel_frekuensi_intensitas.csv", index=False)

```

```

df_puncak.to_csv(output_dir / "daftar_puncak_utama.csv", index=False)

print("Tabel frekuensi dan intensitas:")
print(df_tabel.to_string(index=False))

print("\nDaftar puncak utama:")
print(df_puncak.to_string(index=False))

# -----
# 8. Membuat spektrum IR simulasi untuk setiap molekul
# -----

for kode, data in data_ir.items():
    nama = data["nama"]
    frek_skala = terapkan_faktor_skala(data["frekuensi"])
    intensitas = data["intensitas"]

    y = buat_spektrum(frek_skala, intensitas, x_grid)

    plt.figure(figsize=(9, 5))
    plt.plot(x_grid, y)
    plt.gca().invert_xaxis()
    plt.xlabel("Bilangan Gelombang (cm-1)")
    plt.ylabel("Intensitas IR Simulasi")
    plt.title(f"Spektrum IR Simulasi {nama}")
    plt.tight_layout()

    nama_file = f"spektrum_ir_{kode.lower()}.png"
    plt.savefig(output_dir / nama_file, dpi=300)
    plt.show()

# -----
# 9. Perbandingan spektrum dua molekul
# -----

molekul_1 = "Etanol"
molekul_2 = "Aseton"

data_1 = data_ir[molekul_1]
data_2 = data_ir[molekul_2]

frek_1 = terapkan_faktor_skala(data_1["frekuensi"])
frek_2 = terapkan_faktor_skala(data_2["frekuensi"])

y1 = buat_spektrum(frek_1, data_1["intensitas"], x_grid)
y2 = buat_spektrum(frek_2, data_2["intensitas"], x_grid)

plt.figure(figsize=(9, 5))
plt.plot(x_grid, y1, label=data_1["nama"])
plt.plot(x_grid, y2, label=data_2["nama"])
plt.gca().invert_xaxis()
plt.xlabel("Bilangan Gelombang (cm-1)")
plt.ylabel("Intensitas IR Simulasi")
plt.title("Perbandingan Spektrum IR Simulasi: Etanol dan Aseton")
plt.legend()
plt.tight_layout()

```



```
plt.savefig(output_dir / "perbandingan_spektrum_etanol_aseton.png", dpi=300)
plt.show()

print("\nOutput tersimpan di folder:", output_dir)
```

Kode tersebut menghasilkan beberapa output utama:

1. Tabel frekuensi dan intensitas.
2. Frekuensi terkoreksi dengan faktor skala.
3. Spektrum IR simulasi untuk setiap molekul.
4. Daftar puncak utama.
5. Perbandingan spektrum etanol dan aseton.
6. File CSV hasil analisis.
7. File gambar spektrum.

Data contoh dalam kode harus diganti dengan data hasil praktikum. Jika mahasiswa menggunakan output ChemCompute, maka frekuensi dan intensitas dari output tersebut harus dimasukkan ke struktur data Python.

9. Penjelasan Bagian Kode

Bagian impor pustaka:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path
```

`numpy` digunakan untuk operasi numerik dan pembuatan grid bilangan gelombang. `pandas` digunakan untuk membuat tabel dan menyimpan CSV. `matplotlib` digunakan untuk menggambar spektrum. `Path` digunakan untuk membuat folder output secara rapi.

Bagian parameter umum:

```
FAKTOR_SKALA = 0.96
SIGMA = 25.0
X_MIN = 400
X_MAX = 4000
JUMLAH_TITIK = 5000
```

`FAKTOR_SKALA` digunakan untuk mengoreksi frekuensi komputasi. `SIGMA` mengatur lebar puncak Gaussian. `X_MIN` dan `X_MAX` mengatur rentang spektrum IR. `JUMLAH_TITIK` menentukan kehalusan kurva spektrum.

Semakin besar `JUMLAH_TITIK`, grafik semakin halus, tetapi komputasi sedikit lebih berat. Untuk praktikum, 5000 titik sudah cukup.

10. Fungsi Faktor Skala

Fungsi faktor skala:

```
def terapkan_faktor_skala(frekuensi, faktor_skala=FAKTOR_SKALA):
    frekuensi = np.array(frekuensi, dtype=float)
    return frekuensi * faktor_skala
```

Fungsi ini menerima daftar frekuensi komputasi, mengubahnya menjadi array numerik, lalu mengalikannya dengan faktor skala. Hasilnya adalah frekuensi terkoreksi.

Fungsi ini penting karena memisahkan data asli dan data terkoreksi. Mahasiswa dapat menyimpan keduanya dalam tabel.

Secara metodologis, faktor skala harus dicatat dalam laporan. Jika faktor skala tidak disebutkan, pembaca tidak dapat mengetahui bagaimana frekuensi terkoreksi diperoleh.

11. Fungsi Spektrum Gaussian

Fungsi spektrum Gaussian:

```
def buat_spektrum(frekuensi, intensitas, x_grid, sigma=SIGMA):
    frekuensi = np.array(frekuensi, dtype=float)
    intensitas = np.array(intensitas, dtype=float)

    y = np.zeros_like(x_grid, dtype=float)

    for f, inten in zip(frekuensi, intensitas):
        y += inten * np.exp(-((x_grid - f) ** 2) / (2 * sigma ** 2))

    return y
```

Fungsi ini membuat spektrum simulasi dari daftar frekuensi dan intensitas. Setiap frekuensi diubah menjadi puncak Gaussian. Semua puncak kemudian dijumlahkan.

Makna kimianya adalah bahwa output frekuensi komputasi berupa puncak diskrit dapat divisualisasikan sebagai spektrum kontinu. Spektrum ini tidak identik dengan spektrum eksperimen, tetapi berguna untuk melihat pola puncak secara visual.

Parameter `sigma` perlu dipilih dengan bijaksana. Jika nilai `sigma` terlalu besar, puncak yang terpisah dapat tampak menyatu. Jika terlalu kecil, spektrum menjadi terlalu tajam. Dalam laporan, mahasiswa sebaiknya menyebut nilai `sigma` yang digunakan.

12. Fungsi Identifikasi Puncak Utama

Fungsi identifikasi puncak utama:

```
def identifikasi_puncak_utama(frekuensi, intensitas, jumlah_puncak=5):
    df = pd.DataFrame({
        "frekuensi_cm-1": frekuensi,
        "intensitas_IR": intensitas,
    })

    df = df.sort_values(by="intensitas_IR", ascending=False)
    df = df.head(jumlah_puncak)
    df = df.sort_values(by="frekuensi_cm-1", ascending=False)

    return df.reset_index(drop=True)
```

Fungsi ini mengambil beberapa puncak dengan intensitas terbesar. Puncak-puncak tersebut kemudian diurutkan berdasarkan frekuensi. Fungsi ini membantu mahasiswa menemukan puncak utama tanpa memeriksa seluruh daftar secara manual.

Namun, identifikasi puncak utama berdasarkan intensitas tidak boleh menggantikan analisis kimia. Puncak yang tidak paling kuat tetap dapat penting jika berkaitan dengan gugus fungsi tertentu. Karena itu, hasil fungsi ini harus digunakan sebagai bantuan awal, bukan keputusan final.

13. Fungsi Penugasan Awal Daerah IR

Fungsi penugasan awal:

```
def penugasan_awal(frekuensi):
    if 3200 <= frekuensi <= 3700:
        return "O-H/N-H stretch atau X-H stretch frekuensi tinggi"
    if 2800 <= frekuensi <= 3100:
        return "C-H stretch"
    if 1650 <= frekuensi <= 1800:
        return "C=O stretch"
    if 1000 <= frekuensi <= 1300:
        return "C-O stretch atau mode fingerprint"
    if frekuensi < 1500:
        return "Bending atau fingerprint region"
    return "Mode vibrasi lain"
```

Fungsi ini memberi penugasan awal berdasarkan rentang frekuensi umum. Penugasan ini bersifat panduan, bukan keputusan final. Pada molekul organik, daerah fingerprint sering kompleks. Satu frekuensi dapat melibatkan beberapa gerak atom sekaligus.

Mahasiswa harus memahami bahwa penugasan terbaik dilakukan dengan tiga langkah:

```
frekuensi
→ intensitas
```

→ animasi mode normal

Jika hanya berdasarkan frekuensi, penugasan dapat keliru. Misalnya, puncak pada daerah 1000–1300 cm^{-1} dapat berkaitan dengan C–O stretch, tetapi dapat juga melibatkan mode rangka atau bending lain.

14. Output Tabel Frekuensi dan Intensitas

Kode menghasilkan tabel yang memuat:

1. Kode molekul.
2. Nama molekul.
3. Nomor mode.
4. Frekuensi komputasi.
5. Faktor skala.
6. Frekuensi terkoreksi.
7. Intensitas IR.
8. Penugasan awal.

Format tabel:

Kode Molekul	Mode	Frekuensi Komputasi	Faktor Skala	Frekuensi Terkoreksi	Intensitas IR	Penugasan Awal
Etanol	1	...	0,96	...	...	C–O stretch
Etanol	2	...	0,96	...	...	C–H stretch
Aseton	1	...	0,96	...	...	C=O stretch

Tabel ini menjadi output penting karena dapat langsung digunakan dalam laporan. Mahasiswa harus memastikan bahwa tabel tersebut sesuai dengan data dari output ChemCompute atau software komputasi.

15. Output Spektrum IR Simulasi

Kode juga menghasilkan spektrum IR simulasi untuk setiap molekul. Spektrum ini disimpan sebagai file gambar. Nama file yang dianjurkan:

```
spektrum_ir_h2o.png
spektrum_ir_co2.png
spektrum_ir_nh3.png
spektrum_ir_formaldehida.png
spektrum_ir_etanol.png
spektrum_ir_aseton.png
```

Spektrum harus memiliki:

1. Judul.
2. Sumbu x bilangan gelombang dalam cm^{-1} .
3. Sumbu y intensitas IR simulasi.
4. Sumbu x dibalik dari 4000 ke 400 cm^{-1} .
5. Resolusi cukup baik untuk laporan.

Konvensi sumbu IR yang menurun dari kiri ke kanan perlu dipertahankan karena pembaca spektrum IR umumnya terbiasa dengan pola tersebut.

16. Output Perbandingan Spektrum Dua Molekul

Kode membandingkan spektrum etanol dan aseton. Perbandingan ini dipilih karena etanol dan aseton memiliki gugus fungsi berbeda.

Etanol:

memiliki O-H dan C-O

Aseton:

memiliki C=O

Dengan membandingkan spektrum keduanya, mahasiswa dapat melihat bahwa puncak khas alkohol dan keton muncul pada daerah yang berbeda. Etanol diharapkan menunjukkan ciri O-H dan C-O, sedangkan aseton menunjukkan puncak kuat karbonil.

Contoh analisis:

Perbandingan spektrum etanol dan aseton menunjukkan perbedaan gugus fungsi. Etanol memiliki puncak yang berkaitan dengan O-H dan C-O, sedangkan aseton memiliki puncak kuat pada daerah karbonil C=O. Perbedaan ini menunjukkan bahwa spektrum IR dapat digunakan untuk membedakan alkohol dan keton.

Mahasiswa dapat mengganti pasangan perbandingan sesuai kebutuhan, misalnya formaldehida dan aseton untuk membandingkan dua karbonil, atau H_2O dan NH_3 untuk membandingkan O-H dan N-H.

17. File CSV Hasil Analisis

Jalur Python mandiri harus menghasilkan file CSV. CSV penting karena menyimpan data dalam format yang mudah diperiksa dan digunakan ulang.

File CSV yang dianjurkan:

tabel_frekuensi_intensitas.csv
daftar_puncak_utama.csv

tabel_frekuensi_intensitas.csv memuat semua frekuensi dan intensitas.
daftar_puncak_utama.csv memuat puncak-puncak utama yang dipilih berdasarkan intensitas atau kriteria tertentu.

File CSV menjadi bukti bahwa grafik spektrum dibuat dari data yang jelas. Jika grafik dimasukkan ke laporan, pembaca dapat menelusuri data numeriknya melalui CSV.

18. Validasi Data Sebelum Menggunakan Python

Sebelum data dimasukkan ke Python, mahasiswa harus melakukan validasi. Validasi ini penting karena Python akan memproses apa pun yang dimasukkan. Jika data salah, output juga salah.

Daftar validasi:

```
[ ] Frekuensi berasal dari output yang valid.
[ ] Struktur telah teroptimasi.
[ ] Tidak ada frekuensi imajiner untuk molekul stabil.
[ ] Intensitas IR tersedia.
[ ] Satuan frekuensi adalah  $\text{cm}^{-1}$ .
[ ] Faktor skala ditentukan.
[ ] Data tidak tertukar antar molekul.
[ ] Jumlah mode vibrasi sesuai teori.
[ ] Data asli disimpan.
[ ] Data siap diproses.
```

Validasi ini menunjukkan bahwa penggunaan Python harus didahului oleh pemeriksaan kimia dan komputasi. Python tidak dapat memperbaiki kesalahan data input. Python hanya mengolah data yang diberikan.

19. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum dalam jalur Python mandiri adalah:

Kesalahan	Dampak
Memasukkan frekuensi tanpa intensitas	Spektrum tidak dapat dibuat dengan benar
Lupa menerapkan faktor skala	Frekuensi komputasi tidak terkoreksi
Menghapus frekuensi asli setelah koreksi	Data tidak transparan
Tidak membalik sumbu IR	Grafik tidak mengikuti konvensi IR

Menggunakan sigma terlalu besar	Puncak terlalu menyatu
Menggunakan sigma terlalu kecil	Spektrum terlalu tajam
Menganggap penugasan otomatis selalu benar	Analisis gugus fungsi dapat keliru
Tidak menyimpan CSV	Hasil sulit diverifikasi
Membandingkan spektrum dari metode berbeda tanpa catatan	Perbandingan kurang valid
Menganggap Python menghitung frekuensi kuantum	Kesalahan metodologis

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari agar jalur Python benar-benar mendukung interpretasi spektrum IR.

20. Analisis Kritis terhadap Hasil Python

Hasil Python harus ditafsirkan secara kritis. Spektrum IR simulasi yang dibuat Python bergantung pada data input, faktor skala, dan parameter pelebaran. Jika data input berasal dari metode komputasi yang berbeda, hasilnya tidak boleh dibandingkan secara langsung tanpa catatan. Jika faktor skala dipilih sembarangan, frekuensi terkoreksi dapat menyesatkan. Jika parameter `sigma` terlalu besar, puncak yang sebenarnya terpisah dapat tampak menyatu.

Selain itu, Python hanya memberi penugasan awal berdasarkan rentang frekuensi. Penugasan akhir harus memperhatikan mode normal. Untuk molekul seperti etanol dan aseton, banyak mode dapat bercampur. Puncak pada daerah fingerprint tidak boleh ditafsirkan secara terlalu sederhana.

Pernyataan analisis yang baik:

Spektrum IR simulasi dibuat dari frekuensi dan intensitas hasil komputasi dengan faktor skala 0,96 dan fungsi pelebaran Gaussian. Penugasan puncak utama dilakukan berdasarkan frekuensi terkoreksi, intensitas, dan interpretasi mode normal. Hasil Python digunakan sebagai alat visualisasi dan analisis data, bukan sebagai pengganti perhitungan frekuensi kuantum.

Pernyataan tersebut menunjukkan pemahaman metodologis yang benar.

21. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki implikasi pedagogis yang kuat. Pertama, mahasiswa belajar bahwa spektrum IR dapat dibangun dari daftar frekuensi dan intensitas. Kedua, mahasiswa memahami bahwa faktor skala merupakan bagian penting dari koreksi frekuensi komputasi. Ketiga, mahasiswa belajar membandingkan spektrum berdasarkan gugus fungsi. Keempat, mahasiswa belajar menyimpan data secara reproduktibel dalam CSV. Kelima, mahasiswa belajar bahwa grafik spektrum harus selalu dihubungkan dengan teori vibrasi dan mode normal.

Secara konseptual, jalur Python memperkuat alur berpikir:

```

frekuensi vibrasi
→ intensitas IR
→ faktor skala
→ spektrum simulasi
→ puncak utama
→ penugasan gugus fungsi
→ analisis kimia

```

Dengan alur ini, mahasiswa tidak hanya menjadi pengguna software, tetapi juga menjadi analis data spektroskopi. Mereka belajar bahwa angka, grafik, dan interpretasi harus saling mendukung.

22. Transisi ke Nama File Kode

Subbab 9.6 telah membahas jalur Python mandiri dalam Praktikum 6. Kode Python memuat input daftar frekuensi vibrasi, input intensitas IR, pembuatan spektrum IR simulasi, penerapan faktor skala, identifikasi puncak utama, dan perbandingan spektrum dua molekul. Jalur ini mengubah data dari ChemCompute atau software komputasi menjadi tabel, spektrum, puncak utama, dan file CSV yang dapat digunakan dalam laporan.

Subbab berikutnya akan membahas nama file kode. Penamaan file penting agar kode Praktikum 6 mudah dikenali, mudah dikumpulkan, mudah dijalankan, dan konsisten dengan struktur praktikum sebelumnya. Kode Python yang telah dijelaskan pada subbab ini akan disimpan dengan nama file baku pada subbab 9.7.

9.7 Nama File Kode

Nama file kode untuk Praktikum 6 adalah:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Nama file ini digunakan untuk menyimpan kode Python jalur mandiri yang telah dijelaskan pada subbab 9.6. Di dalam file tersebut, mahasiswa memasukkan daftar frekuensi vibrasi dan intensitas IR, menerapkan faktor skala, membuat spektrum IR simulasi, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan spektrum dua molekul, serta menyimpan hasil analisis dalam file CSV dan gambar spektrum. Dengan demikian, nama file `praktikum_06_spektrum_ir.py` bukan sekadar label teknis, tetapi bagian dari tata kelola data komputasi yang menunjang reproduibilitas praktikum.

Penamaan file yang baik sangat penting dalam kimia komputasi karena satu praktikum dapat menghasilkan banyak file: struktur awal, input perhitungan, output frekuensi, data intensitas, file CSV, grafik spektrum, visualisasi mode normal, dan laporan. Tanpa penamaan yang rapi, mahasiswa akan kesulitan menelusuri hubungan antara data mentah, kode, output, dan analisis. Dalam kerja ilmiah, kerapian penamaan file adalah bagian dari integritas metodologis.

Nama `praktikum_06_spektrum_ir.py` memuat empat unsur utama:

Unsur Nama File	Makna
praktikum	Menunjukkan bahwa file ini bagian dari kegiatan praktikum
06	Menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 6
spektrum_ir	Menunjukkan topik utama kode, yaitu spektrum inframerah
.py	Menunjukkan bahwa file adalah kode Python

Dengan format tersebut, pembaca dapat langsung memahami fungsi file tanpa membuka isinya. File ini adalah kode Python untuk Praktikum 6 tentang frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi.

1. Makna Nama File dalam Praktikum 6

Nama file `praktikum_06_spektrum_ir.py` menunjukkan bahwa kode tersebut berhubungan langsung dengan Praktikum 6. Praktikum ini membahas frekuensi vibrasi, intensitas IR, faktor skala, spektrum IR simulasi, dan identifikasi puncak utama. Oleh karena itu, nama file harus mencerminkan fokus tersebut.

Nama file yang baik harus memenuhi tiga syarat:

1. **Jelas**, sehingga pembaca mengetahui isi file.
2. **Ringkas**, sehingga mudah diketik dan dipanggil melalui terminal.
3. **Konsisten**, sehingga sesuai dengan pola penamaan praktikum sebelumnya.

Nama `praktikum_06_spektrum_ir.py` memenuhi ketiga syarat tersebut. Nama ini tidak terlalu panjang, tetapi cukup informatif. Jika file diberi nama terlalu umum seperti `kode.py`, `ir.py`, atau `spektrum.py`, maka file menjadi sulit dibedakan dari kode praktikum lain. Jika file diberi nama terlalu panjang, penggunaannya menjadi kurang praktis.

Nama yang dianjurkan:

`praktikum_06_spektrum_ir.py`

Nama yang kurang dianjurkan:

`kode.py`
`ir.py`
`spektrum.py`
`praktikum.py`
`freq.py`
`hasil_ir.py`

Nama-nama tersebut terlalu umum dan tidak menunjukkan nomor praktikum. Dalam folder besar yang berisi banyak kode, nama seperti itu mudah tertukar.

2. Alasan Menggunakan Angka 06

Angka 06 menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 6. Penulisan dua digit penting agar urutan file tetap rapi ketika semua file praktikum dikumpulkan dalam satu folder.

Contoh penamaan yang konsisten:

```
praktikum_01_pengantar.py
praktikum_02_struktur_molekul.py
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Jika nomor praktikum hanya ditulis satu digit, pengurutan file dapat menjadi kurang rapi. Misalnya, `praktikum_10.py` dapat muncul sebelum `praktikum_2.py` dalam pengurutan alfabetis tertentu. Dengan dua digit, urutannya lebih stabil dan mudah dibaca.

Penulisan 06 juga menunjukkan kesinambungan dengan praktikum sebelumnya. Pada Praktikum 5, file kode bernama:

```
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
```

Maka pada Praktikum 6, file kode bernama:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Konsistensi ini membantu mahasiswa memahami bahwa setiap praktikum memiliki file kode tersendiri dengan pola nama yang seragam.

3. Alasan Menggunakan Frasa `spektrum_ir`

Frasa `spektrum_ir` dipilih karena mewakili inti jalur Python pada Praktikum 6. Memang Praktikum 6 membahas frekuensi vibrasi, mode normal, intensitas IR, faktor skala, dan puncak utama. Namun, output utama jalur Python adalah spektrum IR simulasi. Oleh karena itu, frasa `spektrum_ir` paling tepat untuk merangkum fungsi kode.

Nama lain yang mungkin tetapi kurang tepat:

```
praktikum_06_frekuensi.py
praktikum_06_vibrasi.py
praktikum_06_intensitas_ir.py
praktikum_06_mode_normal.py
```

Nama-nama tersebut hanya menekankan sebagian isi praktikum. `frekuensi` menekankan daftar frekuensi, tetapi belum menunjukkan simulasi spektrum. `vibrasi` terlalu umum. `intensitas_ir`

hanya menekankan intensitas. `mode_normal` menekankan visualisasi gerak vibrasi, tetapi tidak langsung menunjukkan bahwa kode Python membuat spektrum.

Nama `praktikum_06_spektrum_ir.py` lebih tepat karena mencakup hasil akhir pengolahan data frekuensi dan intensitas, yaitu spektrum IR simulasi.

4. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python

Ekstensi `.py` menunjukkan bahwa file tersebut adalah file Python. Ekstensi ini wajib dipertahankan. Jika ekstensi salah, file dapat tidak dikenali sebagai kode Python atau tidak dapat dijalankan dengan benar.

Nama yang benar:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Nama yang salah:

```
praktikum_06_spektrum_ir.txt
praktikum_06_spektrum_ir.docx
praktikum_06_spektrum_ir.pdf
praktikum_06_spektrum_ir.py.txt
```

Kesalahan `py.txt` sering terjadi jika sistem operasi menyembunyikan ekstensi file. Mahasiswa mungkin mengira file sudah berformat `.py`, padahal sebenarnya masih berupa file teks biasa. Oleh karena itu, sebelum mengumpulkan tugas, mahasiswa harus memastikan ekstensi file benar.

File dapat dijalankan dengan perintah:

```
python praktikum_06_spektrum_ir.py
```

atau pada sistem tertentu:

```
python3 praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Jika file berada dalam folder `kode`, perintahnya dapat ditulis:

```
python kode/praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Perintah tersebut menunjukkan bahwa nama file yang rapi memudahkan eksekusi melalui terminal.

5. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama file menggunakan huruf kecil dan garis bawah:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Penggunaan huruf kecil dan garis bawah memiliki beberapa alasan teknis dan pedagogis.

Pertama, huruf kecil membuat nama file lebih konsisten dan mudah diketik. Kedua, garis bawah menggantikan spasi sehingga file mudah dipanggil melalui terminal. Ketiga, pola ini umum digunakan dalam penamaan file Python dan proyek komputasi. Keempat, nama file menjadi aman digunakan pada berbagai sistem operasi.

Nama yang sebaiknya dihindari:

```
Praktikum 06 Spektrum IR.py
Praktikum_06_Spektrum_IR.py
praktikum_06 spektrum ir.py
praktikum-06-spektrum-ir.py
PRAKTIKUM_06_SPEKTRUM_IR.py
```

Nama dengan spasi dapat menyulitkan pemanggilan di terminal. Nama dengan huruf kapital yang tidak konsisten dapat membingungkan, terutama pada sistem yang membedakan huruf besar dan kecil. Nama dengan tanda hubung juga dapat digunakan dalam beberapa konteks, tetapi garis bawah lebih lazim untuk file Python.

Dengan nama `praktikum_06_spektrum_ir.py`, file menjadi mudah dibaca, mudah diketik, dan konsisten dengan struktur praktikum sebelumnya.

6. Hubungan Nama File dengan Isi Kode

Nama file harus sesuai dengan isi kode. File `praktikum_06_spektrum_ir.py` minimal harus memuat komponen berikut:

1. Impor pustaka Python.
2. Input daftar frekuensi vibrasi.
3. Input intensitas IR.
4. Penerapan faktor skala.
5. Fungsi pembentukan spektrum IR simulasi.
6. Fungsi identifikasi puncak utama.
7. Fungsi penugasan awal puncak.
8. Perbandingan spektrum dua molekul.
9. Penyimpanan tabel frekuensi dan intensitas.
10. Penyimpanan daftar puncak utama.
11. Penyimpanan grafik spektrum.

12. Penyimpanan file CSV hasil analisis.

Jika file bernama `praktikum_06_spektrum_ir.py`, tetapi isinya hanya kode sederhana yang tidak berkaitan dengan spektrum IR, maka nama tersebut tidak sesuai. Nama file yang ilmiah harus mencerminkan isi dan fungsi.

Kerangka awal file dapat ditulis:

```
# =====
# PRAKTIKUM 6
# FREKUENSI VIBRASI DAN SPEKTRUM IR KOMPUTASI
# -----
# Nama file : praktikum_06_spektrum_ir.py
# Fungsi  : Membuat spektrum IR simulasi dari data frekuensi
#            dan intensitas IR, menerapkan faktor skala,
#            mengidentifikasi puncak utama, dan menyimpan CSV.
# =====

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path
```

Komentar awal seperti ini membantu pembaca memahami tujuan kode sejak baris pertama. Dalam pemrograman ilmiah, dokumentasi singkat di awal file sangat dianjurkan.

7. Metadata di Awal File

Selain nama file, kode sebaiknya memuat metadata di bagian awal. Metadata membantu dosen atau pembaca mengetahui identitas praktikum, topik, molekul yang dianalisis, dan output yang dihasilkan.

Contoh metadata:

```
# =====
# PRAKTIKUM 6
# FREKUENSI VIBRASI DAN SPEKTRUM IR KOMPUTASI
# -----
# Nama file   : praktikum_06_spektrum_ir.py
# Topik       : Spektrum IR komputasi
# Molekul     : H2O, CO2, NH3, formaldehida, etanol, aseton
# Input      : Frekuensi vibrasi dan intensitas IR
# Output     : CSV, spektrum IR simulasi, puncak utama
# =====
```

Jika kode dikumpulkan sebagai tugas mahasiswa, identitas pribadi dapat ditambahkan:

```
# Nama mahasiswa :
# NIM            :
```

```
# Kelas      :
# Tanggal    :
```

Metadata ini bukan formalitas kosong. Dalam praktikum komputasi, file kode sering berpindah folder, dikirim melalui sistem pembelajaran, atau diperiksa beberapa minggu setelah praktikum. Metadata membantu file tetap dapat dipahami meskipun terpisah dari konteks awalnya.

8. Letak File dalam Struktur Folder

File `praktikum_06_spektrum_ir.py` sebaiknya ditempatkan dalam folder `kode`. Struktur folder yang dianjurkan adalah:

```
praktikum_06_spektrum_ir/
├── struktur_awal/
│   ├── h2o_awal.xyz
│   ├── co2_awal.xyz
│   ├── nh3_awal.xyz
│   ├── formaldehida_awal.xyz
│   ├── etanol_awal.xyz
│   └── aseton_awal.xyz
├── output_chemcompute/
│   ├── h2o_freq_output.log
│   ├── co2_freq_output.log
│   ├── nh3_freq_output.log
│   ├── formaldehida_freq_output.log
│   ├── etanol_freq_output.log
│   └── aseton_freq_output.log
├── data/
│   └── data_frekuensi_intensitas.csv
├── kode/
│   └── praktikum_06_spektrum_ir.py
├── output_praktikum_06/
│   ├── tabel_frekuensi_intensitas.csv
│   ├── daftar_puncak_utama.csv
│   ├── spektrum_ir_h2o.png
│   ├── spektrum_ir_co2.png
│   ├── spektrum_ir_nh3.png
│   ├── spektrum_ir_formaldehida.png
│   ├── spektrum_ir_etanol.png
│   ├── spektrum_ir_aseton.png
│   └── perbandingan_spektrum_etanol_aseton.png
└── laporan/
    └── laporan_praktikum_06.docx
```

Struktur ini memperlihatkan rantai kerja praktikum. Folder `struktur_awal` menyimpan geometri awal. Folder `output_chemcompute` menyimpan output perhitungan. Folder `data` menyimpan data frekuensi dan intensitas. Folder `kode` menyimpan file Python. Folder `output_praktikum_06` menyimpan hasil Python. Folder `laporan` menyimpan laporan praktikum.

Dengan struktur seperti ini, file `praktikum_06_spektrum_ir.py` memiliki posisi yang jelas dalam sistem kerja.

9. Hubungan Nama File Kode dengan File Input

File `praktikum_06_spektrum_ir.py` dapat menggunakan input dari file CSV, misalnya:

`data_frekuensi_intensitas.csv`

File CSV tersebut memuat frekuensi dan intensitas dari output ChemCompute atau software komputasi lain. Hubungan antara file input dan file kode adalah:

`data_frekuensi_intensitas.csv`
 → `praktikum_06_spektrum_ir.py`
 → tabel, grafik, CSV, dan puncak utama

Format input CSV dapat berupa:

Molekul	Mode	Frekuensi Komputasi (cm ⁻¹)	Intensitas IR
H ₂ O	1	...	...
H ₂ O	2	...	...
H ₂ O	3	...	...
Aseton	1	...	...

Jika data dimasukkan langsung ke dalam kode, file CSV input mungkin tidak diperlukan. Namun, untuk praktikum yang lebih rapi, penggunaan CSV input lebih dianjurkan karena data dan kode dipisahkan. Pemisahan data dan kode merupakan praktik baik dalam komputasi ilmiah.

10. Hubungan Nama File Kode dengan File Output

File `praktikum_06_spektrum_ir.py` menghasilkan beberapa output penting. Nama file output harus konsisten dengan nama file kode dan topik praktikum.

Output yang dianjurkan:

Jenis Output	Nama File
Tabel frekuensi dan intensitas	<code>tabel_frekuensi_intensitas.csv</code>

Daftar puncak utama	daftar_puncak_utama.csv
Spektrum H ₂ O	spektrum_ir_h2o.png
Spektrum CO ₂	spektrum_ir_co2.png
Spektrum NH ₃	spektrum_ir_nh3.png
Spektrum formaldehida	spektrum_ir_formaldehida.png
Spektrum etanol	spektrum_ir_etanol.png
Spektrum aseton	spektrum_ir_aseton.png
Perbandingan etanol-aseton	perbandingan_spektrum_etanol_aseton.png

Hubungan alur data:

```

output frekuensi ChemCompute
→ data_frekuensi_intensitas.csv
→ praktikum_06_spektrum_ir.py
→ tabel_frekuensi_intensitas.csv
→ daftar_puncak_utama.csv
→ spektrum_ir_simulasi.png
→ laporan praktikum

```

Jika laporan menampilkan grafik spektrum, pembaca harus dapat menelusuri grafik tersebut kembali ke kode dan data. Inilah prinsip reproduisibilitas.

11. Reproduisibilitas dan Keterlacakan

Reproduisibilitas berarti hasil dapat dibuat ulang oleh orang lain dengan data dan kode yang sama. Dalam Praktikum 6, reproduisibilitas menuntut agar file `praktikum_06_spektrum_ir.py` dapat dijalankan ulang untuk menghasilkan tabel dan grafik yang sama.

Agar reproduisibel, mahasiswa harus menyimpan:

1. Struktur awal.
2. Output ChemCompute atau output software komputasi.
3. Data frekuensi dan intensitas.
4. File Python `praktikum_06_spektrum_ir.py`.
5. File CSV hasil analisis.
6. Grafik spektrum.
7. Laporan praktikum.

Jika salah satu bagian hilang, rantai reproduisibilitas menjadi lemah. Misalnya, jika grafik spektrum ada tetapi file Python tidak ada, pembaca tidak dapat memeriksa bagaimana grafik dibuat. Jika file Python ada tetapi data frekuensi tidak ada, kode tidak dapat dijalankan ulang.

Nama file kode yang baku membantu menjaga keterlacakan:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
```


Nama tersebut langsung menunjukkan bahwa file ini adalah pusat analisis Python untuk Praktikum 6.

12. Cara Menjalankan File Kode

Jika file berada di folder utama praktikum, perintah untuk menjalankannya adalah:

```
python praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Jika file berada di folder `kode`, perintahnya adalah:

```
python kode/praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Pada sistem tertentu, perintahnya dapat berupa:

```
python3 kode/praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Mahasiswa harus menjalankan file dari direktori kerja yang benar. Jika kode membaca file dari folder `data`, maka jalur relatif harus sesuai. Misalnya:

```
data_path = "data/data_frekuensi_intensitas.csv"
```

Jalur relatif seperti ini lebih baik daripada jalur absolut seperti:

```
C:/Users>Nama/Desktop/praktikum/data_frekuensi_intensitas.csv
```

Jalur absolut membuat kode sulit dijalankan di komputer lain. Jalur relatif mendukung reproduisibilitas.

13. Pengelolaan Versi File

Selama pengerjaan, mahasiswa mungkin membuat beberapa versi file. Revisi dapat terjadi karena memperbaiki data, mengganti faktor skala, memperbaiki grafik, atau menambah fitur identifikasi puncak. Versi sementara boleh dibuat, tetapi harus diberi nama rapi.

Nama versi sementara yang dianjurkan:

```
praktikum_06_spektrum_ir_v01.py  
praktikum_06_spektrum_ir_v02.py  
praktikum_06_spektrum_ir_v03.py
```

Namun, file final yang dikumpulkan sebaiknya tetap bernama:

praktikum_06_spektrum_ir.py

Nama versi yang tidak dianjurkan:

```
kodefix.py
fixlagi.py
ir_final.py
final_bener.py
final_banget.py
praktikum_revisi_terakhir.py
```

Nama seperti itu tidak profesional dan sulit ditelusuri. Dalam kerja ilmiah, versi harus dikelola secara sistematis.

Jika menggunakan sistem pengelolaan versi seperti Git, perubahan kode dapat dilacak lebih baik. Namun, dalam praktikum dasar, penamaan versi sederhana sudah cukup untuk melatih disiplin digital.

14. Standar Minimal Isi File yang Dikumpulkan

File `praktikum_06_spektrum_ir.py` yang dikumpulkan minimal harus dapat melakukan hal berikut:

1. Membaca atau memuat data frekuensi.
2. Membaca atau memuat intensitas IR.
3. Menerapkan faktor skala.
4. Membuat tabel frekuensi asli dan terkoreksi.
5. Membuat spektrum IR simulasi.
6. Mengidentifikasi puncak utama.
7. Membandingkan spektrum dua molekul.
8. Menyimpan hasil dalam CSV.
9. Menyimpan grafik dalam format gambar.
10. Dapat dijalankan tanpa error.

Jika file tidak dapat dijalankan, dosen tidak dapat memverifikasi hasil. Karena itu, sebelum dikumpulkan, mahasiswa harus menjalankan kode dari awal dan memastikan semua output terbentuk.

Daftar periksa file:

```
[ ] Nama file sudah benar: praktikum_06_spektrum_ir.py
[ ] File berekstensi .py, bukan .txt
[ ] Kode dapat dijalankan tanpa error
[ ] Data frekuensi dan intensitas tersedia
[ ] Faktor skala ditulis jelas
[ ] Spektrum IR simulasi terbentuk
[ ] Puncak utama teridentifikasi
```

```
[ ] CSV hasil analisis tersimpan
[ ] Grafik tersimpan
[ ] Output sesuai laporan
```

Daftar periksa ini membantu mahasiswa memastikan bahwa file siap dikumpulkan.

15. Hubungan Nama File dengan Penilaian Praktikum

Nama file yang baku memudahkan penilaian. Jika semua mahasiswa mengumpulkan file dengan nama yang sama, dosen dapat memeriksa kode secara lebih cepat dan sistematis. Dalam kelas besar, penamaan file yang tidak konsisten dapat memperlambat pemeriksaan dan meningkatkan risiko file tertukar.

Instruksi pengumpulan dapat ditulis:

```
Kumpulkan file kode Python dengan nama:
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Jika mahasiswa mengumpulkan file dengan nama berbeda, dosen harus membuka file satu per satu untuk memeriksa isinya. Jika pemeriksaan dilakukan otomatis, nama file yang tidak sesuai dapat menyebabkan file tidak terbaca oleh sistem.

Karena itu, mengikuti nama file baku merupakan bagian dari kedisiplinan praktikum. Penamaan file bukan hal kecil, melainkan bagian dari tata kelola kerja komputasi.

16. Integritas Akademik dalam File Kode

File kode adalah bagian dari bukti akademik. Jika laporan memuat spektrum IR simulasi, maka kode yang menghasilkan spektrum tersebut harus tersedia. Mahasiswa harus mampu menjelaskan isi kode, sumber data, faktor skala, cara identifikasi puncak, dan cara penyimpanan output.

Menggunakan template kode dari buku atau dosen diperbolehkan jika memang menjadi bagian dari praktikum. Namun, mahasiswa tetap harus memahami dan menyesuaikan data dengan hasil perhitungannya sendiri. Menyalin kode tanpa memahami isinya bertentangan dengan tujuan pembelajaran.

Integritas akademik dalam Praktikum 6 menuntut keterhubungan:

```
output ChemCompute
→ data frekuensi dan intensitas
→ praktikum_06_spektrum_ir.py
→ spektrum IR simulasi
→ CSV hasil analisis
→ laporan praktikum
```

Jika laporan menampilkan grafik tetapi kode tidak dapat menghasilkan grafik tersebut, maka integritas data perlu dipertanyakan. Karena itu, file `praktikum_06_spektrum_ir.py` harus dijaga sebagai bukti proses analisis.

17. Kesalahan Umum dalam Penamaan File

Kesalahan umum dalam penamaan file Praktikum 6 meliputi:

Kesalahan	Contoh	Dampak
Menggunakan spasi	<code>praktikum 06 spektrum ir.py</code>	Kurang praktis dijalankan di terminal
Tidak memakai nomor	<code>spektrum_ir.py</code>	Tidak jelas praktikum berapa
Terlalu umum	<code>kode.py</code>	Tidak informatif
Terlalu pendek	<code>ir.py</code>	Sulit dikenali
Ekstensi salah	<code>praktikum_06_spektrum_ir.txt</code>	Tidak dikenali sebagai kode Python
Ekstensi ganda	<code>praktikum_06_spektrum_ir.py.txt</code>	Dapat gagal dijalankan
Nama tidak sesuai isi	<code>praktikum_06_dipol.py</code>	Menyesatkan
Banyak versi tidak jelas	<code>fix.py</code> , <code>final.py</code> , <code>final2.py</code>	Sulit menentukan file final

Mahasiswa harus menghindari kesalahan tersebut. Nama file yang benar dan konsisten menunjukkan kedisiplinan dalam kerja komputasi.

18. Implikasi Pedagogis Penamaan File

Penamaan file memiliki implikasi pedagogis yang penting. Mahasiswa belajar bahwa kerja komputasi bukan hanya menjalankan kode, tetapi juga mengelola data dan output secara tertib. Dalam penelitian komputasi, banyak kesalahan muncul bukan karena teori yang salah, melainkan karena file tertukar, output tidak tersimpan, grafik tidak sesuai data, atau kode tidak dapat dijalankan ulang.

Melalui nama `praktikum_06_spektrum_ir.py`, mahasiswa belajar bahwa:

1. Setiap praktikum memiliki identitas kode.
2. Setiap file harus mencerminkan isi.
3. Setiap output harus dapat ditelusuri ke kode.
4. Setiap grafik harus berasal dari data yang jelas.
5. Setiap laporan harus didukung oleh file yang dapat diverifikasi.

Dengan demikian, penamaan file menjadi bagian dari pembentukan budaya ilmiah. Kerapian digital mendukung kejujuran akademik, keterlacakan, dan reproduibilitas.

19. Transisi ke Output Kode

Subbab 9.7 telah menetapkan nama file kode untuk Praktikum 6, yaitu:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
```

Nama ini dipilih karena jelas, ringkas, konsisten, dan sesuai dengan isi kode. File tersebut digunakan untuk mengolah data frekuensi vibrasi dan intensitas IR menjadi spektrum IR simulasi, frekuensi terkoreksi, daftar puncak utama, perbandingan spektrum dua molekul, serta file CSV hasil analisis.

Subbab berikutnya akan membahas output kode. Pada subbab 9.8, mahasiswa akan mempelajari bentuk output yang harus dihasilkan dari file `praktikum_06_spektrum_ir.py`, yaitu tabel frekuensi dan intensitas, spektrum IR simulasi, daftar puncak utama, spektrum setelah koreksi faktor skala, serta file CSV hasil analisis. Dengan demikian, subbab 9.8 akan menjelaskan bagaimana hasil kode disusun, disimpan, dibaca, dan digunakan dalam laporan praktikum.

9.8 Output Kode

Output kode dalam Praktikum 6 adalah hasil yang diperoleh setelah file `praktikum_06_spektrum_ir.py` dijalankan. Output ini bukan sekadar produk teknis berupa tabel dan grafik, melainkan bagian penting dari proses ilmiah untuk menghubungkan **data frekuensi vibrasi**, **intensitas IR**, **faktor skala**, **spektrum simulasi**, dan **penugasan puncak utama**. Dengan output yang baik, mahasiswa dapat menafsirkan spektrum IR secara sistematis dan menghubungkannya dengan jenis ikatan seperti O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O.

Output kode Praktikum 6 meliputi lima komponen utama:

1. **Tabel frekuensi dan intensitas.**
2. **Spektrum IR simulasi.**
3. **Daftar puncak utama.**
4. **Spektrum setelah koreksi faktor skala.**
5. **File CSV hasil analisis.**

Kelima output tersebut harus saling terhubung. Tabel frekuensi dan intensitas menjadi dasar numerik. Spektrum IR simulasi menjadi representasi visual. Daftar puncak utama menjadi ringkasan interpretatif. Spektrum setelah koreksi faktor skala menunjukkan perbaikan nilai frekuensi komputasi. File CSV menjadi bukti data yang dapat diperiksa ulang. Dengan demikian, output kode harus dipahami sebagai satu kesatuan kerja ilmiah, bukan sebagai file-file terpisah yang berdiri sendiri.

Secara umum, alur output kode dapat digambarkan sebagai berikut:

```
data frekuensi dan intensitas
→ tabel frekuensi komputasi
→ faktor skala
→ tabel frekuensi terkoreksi
→ spektrum IR simulasi
→ daftar puncak utama
→ file CSV dan grafik
→ bahan analisis laporan
```

Alur ini penting karena Praktikum 6 tidak berhenti pada pembuatan grafik. Grafik harus dapat ditelusuri ke data numerik. Data numerik harus dapat ditelusuri ke output komputasi. Output komputasi harus dapat ditelusuri ke struktur molekul dan metode perhitungan. Inilah prinsip reproduktibilitas dalam praktikum kimia komputasi.

1. Makna Output Kode dalam Praktikum 6

Output kode adalah hasil olahan dari data frekuensi vibrasi dan intensitas IR. Data awal biasanya berasal dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, atau software komputasi lain. Kode Python kemudian mengubah data tersebut menjadi bentuk yang lebih mudah dianalisis.

Dalam konteks Praktikum 6, output kode memiliki empat fungsi utama.

Pertama, output kode berfungsi sebagai **rekaman numerik**. Tabel frekuensi dan intensitas menyimpan semua data vibrasi yang digunakan. Tanpa tabel ini, grafik spektrum tidak dapat diverifikasi.

Kedua, output kode berfungsi sebagai **representasi visual**. Spektrum IR simulasi membantu mahasiswa melihat pola puncak secara intuitif. Puncak kuat, puncak lemah, daerah O–H, daerah C=O, dan daerah fingerprint menjadi lebih mudah dibaca dalam bentuk grafik.

Ketiga, output kode berfungsi sebagai **alat interpretasi**. Daftar puncak utama membantu mahasiswa memilih frekuensi yang paling penting untuk dianalisis dalam laporan.

Keempat, output kode berfungsi sebagai **bukti reproduktibilitas**. File CSV dan grafik yang disimpan memungkinkan hasil praktikum diperiksa ulang, dibandingkan, atau digunakan kembali.

Dalam literatur kimia komputasi dan spektroskopi, data numerik dan visualisasi tidak dapat dipisahkan. Karya-karya tentang vibrasi molekul dan spektroskopi IR menekankan bahwa interpretasi spektrum harus didasarkan pada frekuensi, intensitas, mode normal, dan perubahan momen dipol. Karena itu, output kode harus mendukung analisis ilmiah, bukan hanya menghasilkan tampilan yang menarik.

2. Struktur Folder Output

Agar hasil kode tertata rapi, semua output Praktikum 6 sebaiknya disimpan dalam folder khusus:

`output_praktikum_06/`

Isi folder tersebut dapat berupa:

```
output_praktikum_06/
├── tabel_frekuensi_intensitas.csv
├── daftar_puncak_utama.csv
├── spektrum_ir_h2o.png
├── spektrum_ir_co2.png
├── spektrum_ir_nh3.png
├── spektrum_ir_formaldehida.png
├── spektrum_ir_etanol.png
├── spektrum_ir_aseton.png
├── spektrum_ir_terkoreksi_h2o.png
├── spektrum_ir_terkoreksi_co2.png
├── spektrum_ir_terkoreksi_nh3.png
├── spektrum_ir_terkoreksi_formaldehida.png
├── spektrum_ir_terkoreksi_etanol.png
├── spektrum_ir_terkoreksi_aseton.png
└── perbandingan_spektrum_etanol_aseton.png
```

Struktur tersebut memisahkan output analisis dari kode dan data mentah. Dengan struktur ini, mahasiswa dapat dengan mudah menemukan file tabel, daftar puncak, dan grafik spektrum.

Penamaan output harus jelas. Nama seperti `gambar1.png`, `hasil.png`, atau `grafikfix.png` sebaiknya dihindari karena tidak menunjukkan isi file. Nama seperti `spektrum_ir_aseton.png` jauh lebih baik karena langsung menjelaskan bahwa file tersebut adalah spektrum IR simulasi aseton.

3. Output 1: Tabel Frekuensi dan Intensitas

Output pertama adalah **tabel frekuensi dan intensitas**. Tabel ini menjadi dasar seluruh analisis spektrum IR. Setiap baris tabel mewakili satu mode vibrasi dari suatu molekul. Kolom minimal yang harus tersedia adalah:

1. Kode molekul.
2. Nama molekul.
3. Nomor mode vibrasi.
4. Frekuensi komputasi.
5. Faktor skala.
6. Frekuensi terkoreksi.
7. Intensitas IR.

8. Penugasan awal mode vibrasi.

Format tabel yang dianjurkan:

Kode Molekul	Nama Molekul	Mode ke-	Frekuensi Komputasi (cm ⁻¹)	Faktor Skala	Frekuensi Terkoreksi (cm ⁻¹)	Intensitas IR	Penugasan Awal
H ₂ O	H ₂ O	1	...	0,96	...	...	H–O–H bending
H ₂ O	H ₂ O	2	...	0,96	...	...	O–H stretch
CO ₂	CO ₂	1	...	0,96	...	...	CO ₂ bending
Etanol	Etanol	...	...	0,96	...	...	C–O stretch
Aseton	Aseton	...	...	0,96	...	...	C=O stretch

Tabel ini harus mencantumkan frekuensi komputasi dan frekuensi terkoreksi secara berdampingan. Hal ini penting karena mahasiswa harus memahami bahwa frekuensi terkoreksi tidak muncul begitu saja, tetapi berasal dari frekuensi komputasi yang dikalikan dengan faktor skala.

Rumus yang digunakan:

frekuensi terkoreksi = faktor skala × frekuensi komputasi

Contoh:

frekuensi komputasi = 1800 cm⁻¹
 faktor skala = 0,96
 frekuensi terkoreksi = 1728 cm⁻¹

Dengan menyajikan kedua nilai tersebut, laporan menjadi transparan dan mudah diverifikasi.

4. Makna Frekuensi dalam Tabel Output

Frekuensi dalam tabel output menunjukkan posisi vibrasi pada spektrum IR. Frekuensi yang lebih tinggi biasanya berkaitan dengan ikatan yang lebih kuat atau atom yang lebih ringan. Oleh karena itu, mahasiswa harus membaca frekuensi bukan hanya sebagai angka, tetapi sebagai informasi tentang dinamika molekul.

Contoh interpretasi umum:

Daerah Frekuensi	Makna Umum
3200–3700 cm^{-1}	Regangan O–H atau N–H
2800–3100 cm^{-1}	Regangan C–H
1650–1800 cm^{-1}	Regangan C=O
1000–1300 cm^{-1}	Regangan C–O atau daerah fingerprint
< 1500 cm^{-1}	Bending, deformasi, dan fingerprint region

Namun, rentang tersebut tidak boleh digunakan secara kaku. Posisi puncak dapat bergeser karena metode komputasi, basis set, faktor skala, lingkungan kimia, konjugasi, ikatan hidrogen, dan keadaan fase. Karena itu, tabel frekuensi harus dipadukan dengan visualisasi mode normal jika tersedia.

Mahasiswa sebaiknya tidak menulis:

Puncak 1100 cm^{-1} pasti C–O.

Pernyataan yang lebih hati-hati adalah:

Puncak sekitar 1100 cm^{-1} dapat dikaitkan dengan regangan C–O atau mode daerah fingerprint. Penugasan ini perlu dikonfirmasi dengan visualisasi mode normal.

Sikap hati-hati seperti ini menunjukkan analisis ilmiah yang matang.

5. Makna Intensitas IR dalam Tabel Output

Intensitas IR menunjukkan seberapa kuat suatu mode vibrasi menyerap radiasi inframerah. Secara teori, intensitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi. Jika suatu mode menyebabkan perubahan momen dipol yang besar, intensitasnya cenderung kuat. Jika perubahan momen dipol kecil, intensitasnya lemah.

Hubungan konseptual:

perubahan momen dipol besar
→ intensitas IR kuat

perubahan momen dipol kecil
→ intensitas IR lemah

Contoh penting adalah regangan C=O. Ikatan C=O bersifat polar. Ketika panjang ikatan C=O berubah selama vibrasi, momen dipol berubah cukup besar. Karena itu, puncak C=O sering kuat dalam IR.

Sebaliknya, mode tertentu pada molekul simetris dapat memiliki intensitas kecil atau tidak aktif IR jika tidak menyebabkan perubahan momen dipol. CO₂ menjadi contoh penting. Regangan

simetris CO_2 dapat tidak aktif IR karena tidak mengubah momen dipol molekul, sedangkan regangan antisimetri dan bending dapat aktif IR.

Dalam tabel output, intensitas membantu mahasiswa memilih puncak utama. Namun, puncak dengan intensitas paling besar tidak selalu satu-satunya puncak penting. Puncak khas gugus fungsi tetap perlu diperhatikan walaupun intensitasnya tidak paling besar.

6. Output 2: Spektrum IR Simulasi

Output kedua adalah **spektrum IR simulasi**. Spektrum ini dibuat dari daftar frekuensi dan intensitas dengan menggunakan fungsi pelebaran puncak. Dalam kode Python, fungsi Gaussian dapat digunakan untuk mengubah setiap frekuensi diskrit menjadi puncak berbentuk kurva.

Secara konseptual:

```
frekuensi + intensitas
→ fungsi Gaussian
→ puncak spektrum
→ penjumlahan semua puncak
→ spektrum IR simulasi
```

Spektrum IR simulasi biasanya disimpan sebagai file gambar, misalnya:

```
spektrum_ir_h2o.png
spektrum_ir_co2.png
spektrum_ir_nh3.png
spektrum_ir_formaldehida.png
spektrum_ir_etanol.png
spektrum_ir_aseton.png
```

Setiap spektrum harus memiliki:

1. Judul molekul.
2. Sumbu x bilangan gelombang dalam cm^{-1} .
3. Sumbu y intensitas IR simulasi.
4. Arah sumbu x dari 4000 ke 400 cm^{-1} .
5. Grafik yang jelas dan mudah dibaca.
6. Resolusi yang cukup untuk dimasukkan ke laporan.

Konvensi penting dalam spektrum IR adalah sumbu bilangan gelombang biasanya ditampilkan menurun dari kiri ke kanan. Oleh karena itu, grafik Python harus membalik sumbu x. Jika tidak dibalik, grafik masih dapat dibaca, tetapi tidak mengikuti konvensi umum spektroskopi IR.

Contoh deskripsi output:

Gambar spektrum IR simulasi aseton menunjukkan puncak kuat pada daerah karbonil. Puncak ini berkaitan dengan mode regangan C=O yang memiliki intensitas besar karena perubahan momen dipol selama vibrasi karbonil cukup signifikan.

7. Spektrum IR H₂O

Output spektrum H₂O harus menampilkan tiga mode vibrasi utama. H₂O adalah molekul nonlinier dengan tiga atom sehingga memiliki:

$$3N - 6 = 3(3) - 6 = 3 \text{ mode vibrasi}$$

Mode utama H₂O adalah:

1. H–O–H bending.
2. O–H stretching simetris.
3. O–H stretching antisimetri.

Spektrum H₂O berguna untuk memperlihatkan bahwa regangan O–H muncul pada frekuensi tinggi, sedangkan bending H–O–H muncul pada frekuensi lebih rendah.

Output yang baik untuk H₂O harus menunjukkan:

Output	Keterangan
Jumlah mode	3
Puncak rendah relatif	H–O–H bending
Puncak tinggi	O–H stretching
Fokus analisis	Hubungan O–H dengan frekuensi tinggi

Contoh interpretasi:

Spektrum IR simulasi H₂O menunjukkan puncak bending pada frekuensi lebih rendah dan puncak stretching O–H pada frekuensi tinggi. Hal ini sesuai dengan teori bahwa regangan ikatan O–H memerlukan energi lebih besar daripada pembengkokan sudut H–O–H.

8. Spektrum IR CO₂

CO₂ adalah molekul linear dengan tiga atom. Jumlah mode vibrasinya adalah:

$$3N - 5 = 3(3) - 5 = 4 \text{ mode vibrasi}$$

Output spektrum CO₂ harus digunakan untuk menegaskan perbedaan antara momen dipol permanen dan aktivitas IR. CO₂ nonpolar pada keadaan setimbang, tetapi beberapa mode vibrasinya aktif IR karena selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol.

Mode penting CO₂ meliputi:

1. Regangan simetris.
2. Regangan antisimetri.
3. Bending degenerat.

Regangan simetris CO₂ dapat memiliki intensitas IR sangat kecil atau tidak aktif karena tidak mengubah momen dipol. Regangan antisimetri dan bending dapat aktif IR karena menyebabkan perubahan momen dipol.

Contoh interpretasi:

Spektrum IR simulasi CO₂ menunjukkan bahwa molekul nonpolar pada keadaan setimbang tetap dapat memiliki mode IR aktif. Aktivitas IR muncul karena mode vibrasi tertentu menyebabkan perubahan momen dipol sesaat.

Interpretasi ini penting karena menghubungkan Bab 8 dan Bab 9.

9. Spektrum IR NH₃

NH₃ adalah molekul nonlinier dengan empat atom sehingga memiliki:

$$3N - 6 = 3(4) - 6 = 6 \text{ mode vibrasi}$$

Spektrum NH₃ memperlihatkan mode N–H stretching dan H–N–H bending. Karena ikatan N–H melibatkan atom H yang ringan, stretching N–H muncul pada frekuensi tinggi. Namun, posisi N–H berbeda dari O–H karena kekuatan ikatan dan lingkungan atom pusat berbeda.

Output NH₃ harus membantu mahasiswa membandingkan O–H dan N–H. H₂O dan NH₃ sama-sama memiliki vibrasi X–H pada frekuensi tinggi, tetapi mode dan intensitasnya tidak identik.

Contoh interpretasi:

Spektrum IR simulasi NH₃ memperlihatkan puncak N–H stretching pada daerah frekuensi tinggi dan mode bending pada daerah lebih rendah. Pola ini menunjukkan bahwa ikatan yang melibatkan H cenderung berfrekuensi tinggi karena massa H kecil.

10. Spektrum IR Formaldehida

Formaldehida memiliki enam mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan empat atom. Spektrum formaldehida penting karena memperkenalkan puncak karbonil C=O pada molekul sederhana.

Mode yang paling diperhatikan adalah:

1. C=O stretching.
2. C-H stretching.
3. H-C-H bending.
4. Mode deformasi rangka.

Output formaldehida harus menunjukkan puncak C=O yang cukup kuat. Puncak ini kuat karena regangan C=O menyebabkan perubahan momen dipol yang besar.

Contoh interpretasi:

Spektrum IR simulasi formaldehida menunjukkan puncak kuat pada daerah karbonil yang berkaitan dengan regangan C=O. Intensitas puncak ini tinggi karena perubahan panjang ikatan C=O menghasilkan perubahan momen dipol yang signifikan.

Formaldehida menjadi jembatan antara molekul kecil dan molekul organik yang lebih kompleks.

11. Spektrum IR Etanol

Etanol memiliki 21 mode vibrasi karena terdiri atas sembilan atom dan bersifat nonlinier. Spektrum etanol lebih kompleks daripada H₂O, CO₂, NH₃, atau formaldehida karena mengandung beberapa jenis ikatan.

Puncak penting etanol meliputi:

1. O-H stretching.
2. C-H stretching.
3. C-O stretching.
4. Mode bending CH.
5. Mode rangka karbon.

Output etanol harus memperlihatkan bahwa satu molekul organik sederhana dapat memiliki banyak puncak. Puncak O-H berada pada daerah frekuensi tinggi, C-H pada daerah regangan C-H, dan C-O pada daerah yang lebih rendah.

Contoh interpretasi:

Spektrum IR simulasi etanol menunjukkan puncak yang berkaitan dengan O-H, C-H, dan C-O. Puncak O-H muncul pada frekuensi tinggi, sedangkan C-O muncul pada daerah lebih rendah. Spektrum etanol lebih kompleks karena molekul ini memiliki 21 mode vibrasi.

Mahasiswa juga perlu memahami bahwa spektrum komputasi molekul etanol tunggal dapat berbeda dari spektrum eksperimen etanol cair. Dalam fase cair, ikatan hidrogen dapat melebarkan dan menggeser puncak O–H.

12. Spektrum IR Aseton

Aseton memiliki 24 mode vibrasi karena terdiri atas 10 atom dan bersifat nonlinier. Aseton digunakan sebagai model keton dengan gugus karbonil C=O.

Puncak penting aseton meliputi:

1. C=O stretching.
2. C–H stretching.
3. CH₃ bending.
4. Mode rangka molekul.

Puncak C=O pada aseton biasanya menjadi salah satu puncak paling penting karena intensitasnya kuat. Regangan C=O menghasilkan perubahan momen dipol yang besar, sehingga puncaknya menonjol dalam spektrum IR.

Contoh interpretasi:

Spektrum IR simulasi aseton menunjukkan puncak kuat pada daerah karbonil. Puncak ini berkaitan dengan regangan C=O dan menjadi ciri penting gugus keton. Selain itu, gugus metil pada aseton menghasilkan puncak C–H stretching dan bending.

Aseton sangat baik dibandingkan dengan etanol. Etanol memiliki O–H dan C–O, sedangkan aseton memiliki C=O. Perbandingan ini membantu mahasiswa memahami fungsi IR dalam identifikasi gugus fungsi.

13. Output 3: Daftar Puncak Utama

Output ketiga adalah **daftar puncak utama**. Daftar ini berisi puncak-puncak yang paling penting untuk dianalisis. Puncak utama dapat dipilih berdasarkan intensitas terbesar atau berdasarkan relevansi gugus fungsi.

Format daftar puncak utama:

Molekul	Frekuensi (cm ⁻¹)	Terkoreksi	Intensitas IR	Penugasan Awal	Catatan
H ₂ O	...		...	O–H stretch	Frekuensi tinggi

NH ₃	...	...	N–H stretch	X–H stretch
Formaldehida	...	...	C=O stretch	Puncak kuat
Etanol	...	...	O–H stretch	Alkohol
Etanol	...	...	C–O stretch	Alkohol
Aseton	...	...	C=O stretch	Keton

Daftar puncak utama membantu mahasiswa fokus pada puncak yang paling relevan. Namun, daftar ini tidak boleh membuat mahasiswa mengabaikan mode lain. Dalam spektrum IR, daerah fingerprint juga dapat memberi informasi penting, terutama untuk membedakan molekul yang mirip.

Penugasan puncak utama sebaiknya ditulis sebagai penugasan awal jika belum diperiksa melalui animasi mode normal. Contoh:

Puncak sekitar daerah karbonil ditugaskan sementara sebagai C=O stretching berdasarkan frekuensi dan intensitas. Penugasan ini perlu dikonfirmasi dengan visualisasi mode normal.

Pernyataan tersebut lebih ilmiah daripada langsung menyatakan secara mutlak tanpa pemeriksaan mode.

14. Output 4: Spektrum Setelah Koreksi Faktor Skala

Output keempat adalah **spektrum setelah koreksi faktor skala**. Frekuensi komputasi harmonik sering memiliki perbedaan sistematis dibandingkan frekuensi eksperimen. Karena itu, frekuensi dikoreksi menggunakan faktor skala.

Perbedaan output sebelum dan sesudah faktor skala:

Jenis Spektrum	Dasar Frekuensi	Fungsi
Spektrum komputasi asli	Frekuensi langsung dari output	Menunjukkan hasil mentah komputasi
Spektrum terkoreksi	Frekuensi $\times$ faktor skala	Mendekatkan frekuensi pada nilai realistis

Rumus:

$$v_{\text{terkoreksi}} = s \times v_{\text{komputasi}}$$

dengan:

$$\begin{aligned} v_{\text{terkoreksi}} &= \text{frekuensi setelah koreksi} \\ s &= \text{faktor skala} \\ v_{\text{komputasi}} &= \text{frekuensi hasil perhitungan} \end{aligned}$$

Output spektrum terkoreksi dapat disimpan dengan nama:

```
spektrum_ir_terkoreksi_h2o.png
spektrum_ir_terkoreksi_co2.png
spektrum_ir_terkoreksi_nh3.png
spektrum_ir_terkoreksi_formaldehida.png
spektrum_ir_terkoreksi_etanol.png
spektrum_ir_terkoreksi_aseton.png
```

Mahasiswa harus menjelaskan faktor skala yang digunakan. Jika faktor skala adalah 0,96, maka seluruh frekuensi dikalikan 0,96. Faktor skala tidak boleh digunakan tanpa catatan karena pembaca harus mengetahui bagaimana frekuensi terkoreksi diperoleh.

15. Mengapa Spektrum Terkoreksi Diperlukan

Spektrum terkoreksi diperlukan karena perhitungan frekuensi umumnya menggunakan pendekatan harmonik. Molekul nyata bersifat anharmonik. Selain itu, metode komputasi dan basis set memiliki keterbatasan. Akibatnya, frekuensi komputasi sering sedikit berbeda dari nilai eksperimen.

Faktor penyebab perbedaan:

1. Pendekatan harmonik.
2. Keterbatasan metode komputasi.
3. Keterbatasan basis set.
4. Tidak dimasukkannya lingkungan pelarut atau fase.
5. Efek ikatan hidrogen.
6. Efek anharmonisitas vibrasi nyata.
7. Perbedaan antara molekul tunggal fase gas dan sampel eksperimen.

Dengan faktor skala, frekuensi komputasi dapat disesuaikan secara empiris. Namun, faktor skala bukan alat untuk memaksa hasil menjadi sesuai keinginan. Faktor skala harus dipilih berdasarkan metode, basis set, atau instruksi praktikum.

Pernyataan laporan yang baik:

Spektrum IR terkoreksi dibuat dengan mengalikan frekuensi komputasi menggunakan faktor skala 0,96. Koreksi ini diterapkan karena frekuensi harmonik komputasi dapat memiliki galat sistematis terhadap frekuensi eksperimen.

16. Output 5: File CSV Hasil Analisis

Output kelima adalah **file CSV hasil analisis**. File CSV penting karena menyimpan data numerik secara rapi dan dapat dibuka dengan spreadsheet, Python, atau software analisis data lain.

File CSV yang wajib dihasilkan:


```
tabel_frekuensi_intensitas.csv
daftar_puncak_utama.csv
```

tabel_frekuensi_intensitas.csv memuat seluruh data frekuensi, intensitas, faktor skala, frekuensi terkoreksi, dan penugasan awal.

daftar_puncak_utama.csv memuat puncak-puncak yang dipilih untuk dianalisis lebih rinci.

Kolom minimal untuk tabel_frekuensi_intensitas.csv:

```
kode_molekul
nama_molekul
mode_ke
frekuensi_komputasi_cm-1
faktor_skala
frekuensi_terkoreksi_cm-1
intensitas_IR
penugasan_awal
```

Kolom minimal untuk daftar_puncak_utama.csv:

```
kode_molekul
nama_molekul
frekuensi_terkoreksi_cm-1
intensitas_IR
penugasan_awal
catatan
```

File CSV ini menjadi bukti bahwa grafik spektrum dibuat dari data yang jelas. Jika grafik dalam laporan tidak sesuai dengan CSV, maka ada masalah dalam proses analisis.

17. Hubungan Output CSV dengan Laporan Praktikum

CSV bukan file tambahan yang boleh diabaikan. CSV adalah sumber data laporan. Tabel dalam laporan dapat diambil dari CSV. Grafik dalam laporan juga harus berasal dari data yang sama. Dengan demikian, CSV menjadi penghubung antara kode Python dan laporan tertulis.

Alur hubungan:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
→ tabel_frekuensi_intensitas.csv
→ daftar_puncak_utama.csv
→ grafik spektrum
→ laporan praktikum
```

Jika laporan menyatakan bahwa aseton memiliki puncak C=O kuat, maka data tersebut harus dapat ditemukan dalam CSV. Jika laporan menyatakan bahwa etanol memiliki puncak O–H, maka puncak tersebut harus tercantum dalam daftar puncak utama atau tabel frekuensi.

Dengan cara ini, laporan praktikum menjadi berbasis data, bukan sekadar narasi.

18. Perbandingan Spektrum sebagai Output Tambahan

Selain output wajib, kode juga dapat menghasilkan grafik perbandingan dua molekul. Output ini sangat berguna untuk analisis gugus fungsi.

Contoh file:

perbandingan_spektrum_etanol_aseton.png

Perbandingan etanol dan aseton penting karena keduanya memiliki gugus fungsi berbeda. Etanol memiliki O–H dan C–O, sedangkan aseton memiliki C=O. Dengan membandingkan spektrum keduanya, mahasiswa dapat melihat bagaimana gugus fungsi memengaruhi pola puncak IR.

Contoh interpretasi:

Perbandingan spektrum etanol dan aseton menunjukkan bahwa etanol memiliki ciri puncak O–H dan C–O, sedangkan aseton memiliki puncak kuat C=O. Perbedaan ini menunjukkan bahwa spektrum IR dapat digunakan untuk membedakan alkohol dan keton.

Perbandingan lain yang dapat dibuat:

Perbandingan	Fokus
H ₂ O vs NH ₃	O–H dan N–H
H ₂ O vs CO ₂	Nonlinier dan linear
Formaldehida vs aseton	Karbonil sederhana dan keton
Etanol vs aseton	Alkohol dan keton
Etanol vs formaldehida	O–H/C–O dan C=O

Output perbandingan membantu mahasiswa melihat bahwa spektrum IR adalah alat identifikasi struktur.

19. Validasi Output Kode

Setelah kode dijalankan, mahasiswa harus memvalidasi output. Validasi dilakukan untuk memastikan bahwa tabel, grafik, dan CSV benar-benar sesuai dengan data input.

Daftar validasi:

```
[ ] File tabel_frekuensi_intensitas.csv terbentuk.
[ ] File daftar_puncak_utama.csv terbentuk.
```

[] Semua molekul muncul dalam tabel.
 [] Jumlah mode vibrasi sesuai teori.
 [] Frekuensi komputasi tercatat.
 [] Faktor skala tercatat.
 [] Frekuensi terkoreksi benar.
 [] Intensitas IR tercatat.
 [] Grafik spektrum terbentuk.
 [] Sumbu IR dibalik dari 4000 ke 400 cm^{-1} .
 [] Puncak utama sesuai data intensitas.
 [] Nama file output jelas.
 [] Output dapat digunakan dalam laporan.

Validasi ini penting karena kode yang berjalan tanpa error belum tentu menghasilkan output yang benar secara ilmiah. Misalnya, grafik dapat terbentuk, tetapi jika data frekuensi salah atau sumbu tidak sesuai, interpretasi spektrum menjadi keliru.

20. Kesalahan Umum pada Output Kode

Beberapa kesalahan umum dalam output kode Praktikum 6 adalah:

Kesalahan	Dampak
Tabel tidak memuat frekuensi asli	Proses koreksi tidak transparan
Faktor skala tidak dicatat	Frekuensi terkoreksi tidak dapat diverifikasi
Intensitas tidak dimasukkan	Spektrum tidak menggambarkan kuat-lemah puncak
Sumbu IR tidak dibalik	Grafik tidak mengikuti konvensi IR
Nama file output terlalu umum	File sulit dikenali
CSV tidak disimpan	Data sulit diperiksa ulang
Puncak utama hanya dipilih dari frekuensi, bukan intensitas	Analisis puncak kurang tepat
Penugasan puncak terlalu mutlak	Berisiko salah jika mode normal tidak diperiksa
Grafik tidak sesuai data CSV	Reprodusibilitas bermasalah
Output ChemCompute tidak disimpan	Data asal tidak dapat diverifikasi

Kesalahan-kesalahan ini menunjukkan bahwa output kode harus diperiksa secara ilmiah, bukan hanya secara teknis.

21. Analisis Kritis terhadap Output Kode

Output kode Python harus dibaca secara kritis. Spektrum simulasi bergantung pada beberapa pilihan teknis, seperti faktor skala, nilai pelebaran Gaussian, rentang bilangan gelombang, dan data intensitas. Perubahan parameter tersebut dapat memengaruhi tampilan spektrum.

Misalnya, jika nilai pelebaran Gaussian terlalu besar, puncak C=O dan puncak lain yang berdekatan dapat tampak menyatu. Jika terlalu kecil, spektrum tampak terlalu tajam dan kurang menyerupai spektrum eksperimen. Jika faktor skala tidak sesuai, posisi puncak dapat bergeser terlalu jauh. Jika intensitas berasal dari metode berbeda, perbandingan antar molekul menjadi kurang kuat.

Oleh karena itu, mahasiswa harus menyebutkan parameter yang digunakan:

Spektrum IR simulasi dibuat menggunakan fungsi Gaussian dengan parameter lebar puncak tertentu. Frekuensi dikoreksi menggunakan faktor skala 0,96. Data frekuensi dan intensitas berasal dari output perhitungan frekuensi yang telah divalidasi.

Pernyataan seperti ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami bagaimana output dibuat.

22. Kriteria Output yang Layak Dimasukkan ke Laporan

Tidak semua output otomatis layak dimasukkan ke laporan. Output yang dimasukkan harus memenuhi kriteria berikut:

1. Data berasal dari perhitungan yang valid.
2. Tidak ada frekuensi imajiner untuk molekul stabil.
3. Frekuensi dan intensitas terbaca jelas.
4. Faktor skala disebutkan.
5. Grafik memiliki label sumbu.
6. Grafik memiliki judul.
7. Grafik mengikuti konvensi IR.
8. Puncak utama dapat diidentifikasi.
9. File CSV tersedia.
10. Output sesuai dengan pembahasan.

Jika grafik tidak memiliki label sumbu, pembaca tidak dapat memahami data. Jika faktor skala tidak disebutkan, pembaca tidak dapat mengevaluasi frekuensi terkoreksi. Jika puncak utama tidak dijelaskan, grafik hanya menjadi ilustrasi tanpa analisis.

Output yang baik selalu disertai interpretasi.

23. Contoh Narasi untuk Laporan Praktikum

Mahasiswa dapat menulis narasi output sebagai berikut:

Kode praktikum_06_spektrum_ir.py menghasilkan tabel frekuensi dan intensitas IR untuk semua molekul model. Frekuensi komputasi dikoreksi menggunakan faktor

skala 0,96. Data frekuensi dan intensitas kemudian digunakan untuk membuat spektrum IR simulasi dengan fungsi Gaussian. Output utama berupa `tabel_frekuensi_intensitas.csv`, `daftar_puncak_utama.csv`, spektrum IR masing-masing molekul, dan grafik perbandingan spektrum etanol-aseton.

Contoh narasi interpretatif:

Spektrum IR simulasi aseton menunjukkan puncak kuat pada daerah karbonil, yang ditugaskan sebagai regangan C=O. Spektrum etanol menunjukkan puncak yang berkaitan dengan O-H dan C-O. Perbandingan kedua spektrum memperlihatkan perbedaan ciri alkohol dan keton.

Narasi seperti ini menghubungkan output kode dengan analisis kimia.

24. Implikasi Pedagogis Output Kode

Output kode Praktikum 6 memiliki implikasi pedagogis yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa spektrum IR dapat dibangun dari data frekuensi dan intensitas. Kedua, mahasiswa belajar bahwa grafik harus dapat ditelusuri ke data numerik. Ketiga, mahasiswa belajar menerapkan faktor skala secara eksplisit. Keempat, mahasiswa belajar mengidentifikasi puncak utama berdasarkan frekuensi dan intensitas. Kelima, mahasiswa belajar membandingkan spektrum dua molekul berdasarkan gugus fungsi.

Dengan output kode, mahasiswa tidak hanya melihat spektrum sebagai gambar, tetapi memahami bagaimana spektrum disusun. Mereka belajar bahwa puncak IR berasal dari mode vibrasi, intensitas berasal dari perubahan momen dipol, dan posisi puncak dipengaruhi oleh kekuatan ikatan, massa atom, metode komputasi, dan faktor skala.

Secara konseptual, output kode memperkuat alur:

```
mode normal
→ frekuensi
→ intensitas IR
→ faktor skala
→ spektrum simulasi
→ puncak utama
→ penugasan gugus fungsi
→ analisis kimia
```

Alur ini menjadi dasar untuk subbab berikutnya, yaitu analisis puncak IR berdasarkan jenis ikatan.

25. Transisi ke Analisis

Subbab 9.8 telah menjelaskan output kode dari file `praktikum_06_spektrum_ir.py`. Output yang dihasilkan meliputi tabel frekuensi dan intensitas, spektrum IR simulasi, daftar puncak utama,

spektrum setelah koreksi faktor skala, serta file CSV hasil analisis. Output tersebut menjadi dasar untuk membaca dan menafsirkan spektrum IR komputasi secara ilmiah.

Subbab berikutnya akan membahas analisis. Pada subbab 9.9, mahasiswa akan menghubungkan puncak IR dengan jenis ikatan seperti O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O. Dengan demikian, output kode yang telah dibahas pada subbab ini akan digunakan sebagai bahan utama untuk menjelaskan makna kimia dari spektrum IR.

9.9 Analisis

Analisis dalam Praktikum 6 diarahkan untuk menghubungkan **puncak IR** dengan **jenis ikatan** dan **mode vibrasi** yang terdapat dalam molekul. Setelah mahasiswa memperoleh tabel frekuensi, intensitas IR, spektrum simulasi, daftar puncak utama, dan spektrum terkoreksi, tahap berikutnya adalah menjelaskan makna kimia dari output tersebut. Analisis tidak boleh berhenti pada pernyataan bahwa “puncak muncul pada frekuensi tertentu”, tetapi harus menjawab pertanyaan yang lebih mendasar: **gerak atom apa yang menghasilkan puncak tersebut, ikatan apa yang terlibat, mengapa puncaknya berada pada daerah itu, dan mengapa intensitasnya kuat atau lemah.**

Dalam Praktikum 6, mahasiswa menghubungkan puncak IR dengan jenis ikatan seperti:

1. **O–H**
2. **N–H**
3. **C–H**
4. **C=O**
5. **C–O**

Kelima jenis ikatan tersebut dipilih karena sering muncul dalam interpretasi spektrum IR molekul organik dan anorganik sederhana. H₂O memperlihatkan O–H, NH₃ memperlihatkan N–H, formaldehida dan aseton memperlihatkan C=O, etanol memperlihatkan O–H, C–H, dan C–O, sedangkan CO₂ memperlihatkan hubungan antara mode vibrasi molekul linear dan aktivitas IR. Dengan molekul-molekul model tersebut, mahasiswa dapat memahami bahwa spektrum IR merupakan representasi gerak vibrasi molekul, bukan sekadar daftar angka.

Analisis IR harus selalu memperhatikan tiga komponen:

frekuensi
→ posisi puncak pada spektrum

intensitas
→ kuat atau lemahnya serapan IR

mode normal
→ gerak atom yang menghasilkan puncak

Jika mahasiswa hanya membaca frekuensi tanpa melihat intensitas dan mode normal, analisis menjadi dangkal. Jika hanya melihat intensitas tanpa memahami jenis vibrasi, analisis menjadi

tidak bermakna. Jika hanya menghafal daerah gugus fungsi tanpa memeriksa output komputasi, analisis menjadi tidak kritis. Oleh karena itu, subbab ini menekankan bahwa interpretasi spektrum IR harus menggabungkan teori vibrasi, output komputasi, visualisasi mode normal, dan pemahaman kimia gugus fungsi.

1. Pengertian Analisis Puncak IR

Analisis puncak IR adalah proses menafsirkan posisi dan intensitas puncak pada spektrum inframerah berdasarkan mode vibrasi molekul. Setiap puncak pada spektrum IR berkaitan dengan suatu mode vibrasi yang aktif IR. Suatu mode aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol molekul.

Secara konseptual:

```
mode vibrasi
→ perubahan momen dipol
→ serapan IR
→ puncak pada spektrum
```

Jika mode vibrasi tidak menyebabkan perubahan momen dipol, maka mode tersebut tidak aktif IR atau intensitasnya sangat kecil. Oleh karena itu, puncak IR tidak hanya bergantung pada adanya ikatan tertentu, tetapi juga pada bagaimana ikatan tersebut bergetar dan apakah getaran tersebut mengubah momen dipol.

Analisis puncak IR harus menjawab beberapa pertanyaan:

1. Pada frekuensi berapa puncak muncul?
2. Apakah frekuensi tersebut sudah dikoreksi dengan faktor skala?
3. Seberapa besar intensitasnya?
4. Ikatan atau gugus fungsi apa yang mungkin menghasilkan puncak tersebut?
5. Apakah mode tersebut berupa stretching, bending, atau mode kolektif?
6. Apakah penugasan puncak didukung oleh visualisasi mode normal?
7. Apakah hasilnya sesuai dengan teori kekuatan ikatan dan massa atom?
8. Apakah ada perbedaan antara spektrum komputasi dan spektrum eksperimen yang perlu dijelaskan?

Dengan menjawab pertanyaan-pertanyaan tersebut, mahasiswa dapat menyusun analisis yang lebih ilmiah dan tidak hanya berupa hafalan daerah IR.

2. Dasar Teoretis Hubungan Ikatan dan Frekuensi Vibrasi

Frekuensi vibrasi suatu ikatan dipengaruhi oleh dua faktor utama: **kekuatan ikatan** dan **massa atom yang bergetar**. Dalam model osilator harmonik, hubungan dasar frekuensi dengan konstanta gaya dan massa tereduksi dapat ditulis secara konseptual sebagai:

$$\nu \propto \sqrt{(k / \mu)}$$

dengan:

ν = frekuensi vibrasi
 k = konstanta gaya ikatan
 μ = massa tereduksi

Dari hubungan ini diperoleh dua prinsip penting. Pertama, ikatan yang lebih kuat memiliki konstanta gaya lebih besar sehingga frekuensinya lebih tinggi. Kedua, atom yang lebih ringan menghasilkan massa tereduksi lebih kecil sehingga frekuensinya lebih tinggi.

Prinsip tersebut menjelaskan mengapa O–H, N–H, dan C–H muncul pada daerah frekuensi tinggi. Ketiganya melibatkan atom hidrogen yang ringan. Prinsip yang sama juga menjelaskan mengapa C=O muncul pada daerah cukup tinggi dan biasanya kuat, karena C=O merupakan ikatan rangkap yang kaku dan polar. Sebaliknya, C–O sebagai ikatan tunggal biasanya muncul pada daerah lebih rendah daripada C=O.

Secara ringkas:

Ikatan	Karakter Umum	Kecenderungan Frekuensi
O–H	Ikatan dengan H, relatif kuat dan polar	Tinggi
N–H	Ikatan dengan H, cukup kuat dan polar	Tinggi
C–H	Ikatan dengan H	Tinggi
C=O	Ikatan rangkap kuat dan polar	Menengah-tinggi, sering kuat
C–O	Ikatan tunggal polar	Menengah

Tabel tersebut bersifat panduan. Posisi puncak dapat bergeser karena lingkungan kimia, konjugasi, ikatan hidrogen, substituen, fase, metode komputasi, basis set, dan faktor skala. Karena itu, analisis IR harus menghindari klaim mutlak tanpa pemeriksaan mode normal.

3. Latar Historis Interpretasi Spektrum IR

Secara historis, spektroskopi IR berkembang sebagai metode untuk mempelajari gerak vibrasi molekul. Sebelum kimia komputasi berkembang luas, interpretasi spektrum IR dilakukan terutama dengan membandingkan puncak eksperimen terhadap tabel daerah gugus fungsi dan spektrum referensi. Pendekatan tersebut sangat berguna, tetapi sering bersifat empiris. Seorang analis

melihat puncak pada daerah tertentu, lalu mengaitkannya dengan O–H, C=O, C–H, atau gugus lain berdasarkan pengalaman dan data literatur.

Perkembangan mekanika kuantum dan teori vibrasi molekul memperdalam pemahaman tersebut. Karya-karya klasik seperti Wilson, Decius, dan Cross menjelaskan vibrasi molekul melalui mode normal. Herzberg menempatkan spektrum molekul dalam kerangka struktur dan energi. Harris dan Bertolucci menghubungkan simetri dengan spektroskopi. Dalam kimia komputasi modern, karya Jensen, Cramer, Leach, Lewars, Levine, Atkins dan Friedman, serta McQuarrie dan Simon memperlihatkan bahwa frekuensi vibrasi dapat dihitung dari permukaan energi potensial dan matriks Hessian.

Dengan perkembangan ini, interpretasi IR tidak lagi harus sepenuhnya bergantung pada hafalan tabel. Mahasiswa dapat menghitung frekuensi, melihat mode normal, membuat spektrum simulasi, lalu membandingkannya dengan prinsip spektroskopi. Praktikum 6 memanfaatkan pendekatan modern tersebut. Mahasiswa tidak hanya bertanya “puncak ini biasanya gugus apa?”, tetapi juga bertanya “mode normal apa yang menghasilkan puncak ini dan mengapa intensitasnya demikian?”

4. Prinsip Umum Penugasan Puncak IR

Penugasan puncak IR adalah proses menghubungkan puncak pada spektrum dengan jenis vibrasi tertentu. Dalam Praktikum 6, penugasan dilakukan secara bertahap.

Tahap pertama adalah membaca **frekuensi terkoreksi**. Frekuensi terkoreksi lebih layak dibanding frekuensi harmonik mentah karena sudah diterapkan faktor skala. Tahap kedua adalah membaca **intensitas IR**. Puncak dengan intensitas besar lebih mudah terlihat pada spektrum dan sering menunjukkan perubahan momen dipol yang signifikan. Tahap ketiga adalah melihat **mode normal**. Visualisasi mode normal membantu memastikan apakah puncak tersebut benar-benar berasal dari O–H stretching, C=O stretching, C–O stretching, atau mode lain.

Alur penugasan yang dianjurkan:

```
frekuensi terkoreksi
→ intensitas IR
→ daerah gugus fungsi
→ visualisasi mode normal
→ penugasan puncak
→ penjelasan kimia
```

Contoh:

```
Puncak kuat pada daerah karbonil
→ kemungkinan C=O stretch
→ periksa mode normal
→ jika C dan O bergerak saling menjauh-mendekat
→ penugasan sebagai C=O stretch diperkuat
```

Penugasan yang hanya berdasarkan frekuensi tanpa visualisasi dapat digunakan sebagai penugasan awal, tetapi belum ideal. Pada molekul organik yang memiliki banyak atom, satu mode normal sering melibatkan gerak beberapa ikatan sekaligus. Karena itu, analisis harus menggunakan istilah seperti “dominan” atau “terutama” jika mode tidak murni satu gerakan.

Contoh kalimat yang baik:

Puncak tersebut ditugaskan sebagai regangan C=O dominan karena frekuensinya berada pada daerah karbonil, intensitasnya kuat, dan visualisasi mode normal menunjukkan gerakan utama pada ikatan C=O.

Kalimat tersebut lebih ilmiah daripada:

Puncak itu pasti C=O.

5. Analisis Ikatan O–H

Ikatan O–H muncul pada molekul H₂O dan etanol. O–H biasanya menghasilkan puncak pada daerah frekuensi tinggi karena melibatkan atom H yang ringan dan ikatan O–H yang relatif kuat. Dalam model osilator harmonik, massa hidrogen yang kecil menyebabkan massa tereduksi kecil, sehingga frekuensi vibrasinya tinggi.

Secara konseptual:

O–H
 → H ringan
 → ikatan relatif kuat
 → frekuensi stretching tinggi

Pada H₂O, mode O–H muncul sebagai regangan simetris dan regangan antisimetri. Selain itu, H₂O juga memiliki mode bending H–O–H pada frekuensi lebih rendah. Perbandingan ini penting karena dalam molekul yang sama, stretching dan bending muncul pada daerah berbeda.

Pada etanol, O–H juga menjadi puncak penting. Namun, perlu dibedakan antara spektrum komputasi molekul tunggal dan spektrum eksperimen. Dalam perhitungan molekul tunggal fase gas, O–H etanol dapat muncul sebagai puncak relatif tajam. Dalam spektrum eksperimen fase cair, O–H sering melebar karena ikatan hidrogen antarmolekul. Ini menunjukkan bahwa puncak O–H sangat sensitif terhadap lingkungan.

Analisis O–H dalam laporan dapat ditulis:

Puncak O–H muncul pada daerah frekuensi tinggi karena ikatan O–H melibatkan atom H yang ringan dan memiliki konstanta gaya cukup besar. Pada H₂O, mode O–H stretching muncul pada frekuensi lebih tinggi daripada mode bending H–O–H. Pada etanol, puncak O–H juga muncul pada daerah tinggi, tetapi dalam eksperimen dapat melebar akibat ikatan hidrogen.

Analisis ini menghubungkan teori massa, kekuatan ikatan, mode vibrasi, dan efek lingkungan.

6. Analisis Ikatan N–H

Ikatan N–H muncul pada NH_3 . Seperti O–H, N–H juga melibatkan atom H yang ringan sehingga stretching N–H muncul pada frekuensi tinggi. Namun, posisi N–H tidak sama persis dengan O–H karena kekuatan ikatan, elektronegativitas atom pusat, dan lingkungan molekul berbeda.

NH_3 memiliki enam mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan empat atom. Mode pentingnya mencakup stretching N–H dan bending H–N–H. Stretching N–H muncul pada daerah frekuensi tinggi, sedangkan bending muncul lebih rendah.

Secara konseptual:

NH_3
 → memiliki ikatan N–H
 → H ringan
 → stretching N–H frekuensi tinggi
 → bending H–N–H lebih rendah

Dalam analisis, mahasiswa dapat membandingkan NH_3 dengan H_2O . Keduanya memiliki ikatan X–H, tetapi X berbeda. H_2O memiliki O–H, sedangkan NH_3 memiliki N–H. Perbandingan ini membantu memahami bahwa frekuensi X–H dipengaruhi oleh atom pusat dan kekuatan ikatan.

Contoh analisis:

Puncak N–H pada NH_3 muncul pada daerah frekuensi tinggi karena vibrasi tersebut melibatkan atom H yang ringan. Namun, frekuensi N–H berbeda dari O–H karena ikatan N–H dan O–H memiliki kekuatan serta polaritas yang berbeda. Mode bending H–N–H muncul pada frekuensi lebih rendah daripada mode stretching N–H.

Analisis N–H juga dapat dikaitkan dengan intensitas. Jika mode N–H menyebabkan perubahan momen dipol yang cukup besar, intensitasnya akan terlihat dalam spektrum IR.

7. Analisis Ikatan C–H

Ikatan C–H muncul pada formaldehida, etanol, dan aseton. C–H juga melibatkan atom H yang ringan, sehingga stretching C–H muncul pada daerah frekuensi tinggi, umumnya lebih rendah daripada banyak O–H atau N–H, tetapi tetap berada pada wilayah regangan X–H.

Secara konseptual:

- C-H
- melibatkan H
- frekuensi stretching tinggi
- muncul pada daerah regangan C-H

Pada formaldehida, C-H terdapat pada gugus CH_2 . Pada etanol, C-H terdapat pada gugus CH_3 dan CH_2 . Pada aseton, C-H terdapat pada dua gugus CH_3 . Karena lingkungan C-H berbeda, puncak-puncak C-H dapat muncul lebih dari satu. Pada molekul organik, puncak C-H sering tidak berdiri sendiri sebagai satu puncak tunggal, tetapi muncul sebagai beberapa mode stretching dan bending.

C-H bending biasanya muncul pada daerah lebih rendah daripada C-H stretching. Oleh karena itu, mahasiswa harus membedakan antara regangan C-H dan deformasi C-H.

Contoh analisis:

Puncak C-H pada formaldehida, etanol, dan aseton muncul pada daerah regangan C-H karena melibatkan atom H yang ringan. Pada etanol dan aseton, jumlah ikatan C-H lebih banyak sehingga spektrum menunjukkan beberapa mode C-H stretching dan bending. Mode stretching C-H muncul pada frekuensi lebih tinggi daripada mode bending C-H.

Analisis C-H sering lebih kompleks daripada O-H tunggal karena molekul organik memiliki banyak ikatan C-H yang tidak selalu ekuivalen.

8. Analisis Ikatan C=O

Ikatan C=O muncul pada formaldehida dan aseton. C=O adalah salah satu gugus paling penting dalam interpretasi spektrum IR karena regangan karbonil biasanya muncul sebagai puncak kuat. Kekuatan puncak C=O berkaitan dengan dua hal: ikatan C=O cukup kuat dan polar, serta regangan C=O menyebabkan perubahan momen dipol yang signifikan.

Secara konseptual:

- C=O
- ikatan rangkap kuat
- frekuensi regangan cukup tinggi
- ikatan polar
- perubahan momen dipol besar
- intensitas IR kuat

Pada formaldehida, C=O berada pada molekul karbonil sederhana. Pada aseton, C=O berada dalam lingkungan keton dengan dua gugus metil. Keduanya memiliki puncak C=O, tetapi posisi frekuensinya dapat berbeda karena lingkungan kimia berbeda. Substituen, konjugasi, efek induktif, dan interaksi antarmolekul dapat menggeser frekuensi karbonil.

Analisis C=O dalam laporan dapat ditulis:

Puncak kuat pada spektrum formaldehida dan aseton ditugaskan sebagai regangan C=O. Penugasan ini didukung oleh posisi puncak pada daerah karbonil, intensitas yang besar, dan karakter ikatan C=O yang polar. Regangan C=O menyebabkan perubahan momen dipol yang signifikan sehingga puncaknya kuat pada spektrum IR.

Mahasiswa harus berhati-hati agar tidak menyatakan semua C=O muncul pada angka yang sama. Frekuensi karbonil dapat bergeser bergantung struktur molekul. Formaldehida dan aseton dapat memiliki posisi C=O yang berbeda karena lingkungan karbonilnya berbeda.

9. Analisis Ikatan C–O

Ikatan C–O muncul pada etanol. C–O adalah ikatan tunggal polar. Frekuensi regangan C–O biasanya muncul pada daerah lebih rendah daripada C=O karena C–O adalah ikatan tunggal, sehingga konstanta gayanya lebih kecil dibanding ikatan rangkap C=O.

Secara konseptual:

C–O
 → ikatan tunggal polar
 → frekuensi lebih rendah daripada C=O
 → sering muncul pada daerah fingerprint

Pada etanol, puncak C–O dapat muncul bersama mode lain dalam daerah fingerprint. Karena daerah fingerprint kompleks, penugasan C–O sebaiknya tidak hanya berdasarkan angka frekuensi, tetapi juga diperiksa melalui mode normal.

Contoh analisis:

Puncak pada daerah C–O dalam spektrum etanol dapat dikaitkan dengan regangan C–O. Frekuensinya lebih rendah daripada C=O karena C–O merupakan ikatan tunggal dengan konstanta gaya lebih kecil. Namun, karena daerah ini termasuk fingerprint region, penugasan perlu dikonfirmasi dengan visualisasi mode normal.

Analisis ini menunjukkan kehati-hatian ilmiah. Dalam molekul organik, C–O stretching sering bercampur dengan gerak rangka molekul dan bending C–H.

10. Analisis H₂O: O–H Stretching dan H–O–H Bending

H₂O menjadi model paling sederhana untuk menganalisis O–H. Karena H₂O memiliki tiga atom dan berbentuk nonlinier, jumlah mode vibrasinya adalah tiga. Mode tersebut terdiri atas dua mode stretching O–H dan satu mode bending H–O–H.

Analisis H₂O harus menekankan perbedaan antara stretching dan bending. Stretching O–H muncul pada frekuensi tinggi karena melibatkan perubahan panjang ikatan O–H. Bending H–O–H muncul pada frekuensi lebih rendah karena hanya mengubah sudut ikatan.

Alur analisis:

H₂O

- 3 mode vibrasi
- bending H–O–H pada frekuensi lebih rendah
- stretching O–H pada frekuensi lebih tinggi
- puncak O–H menunjukkan pengaruh H ringan dan ikatan kuat

Contoh paragraf laporan:

Spektrum IR simulasi H₂O menunjukkan mode bending H–O–H pada frekuensi lebih rendah dan mode stretching O–H pada frekuensi lebih tinggi. Perbedaan ini sesuai dengan teori osilator harmonik, karena regangan ikatan O–H memerlukan energi lebih besar daripada perubahan sudut H–O–H. Selain itu, atom H yang ringan menyebabkan vibrasi O–H berada pada daerah frekuensi tinggi.

H₂O juga menghubungkan Bab 8 dan Bab 9. Pada Bab 8, H₂O bersifat polar karena bentuknya bengkok. Pada Bab 9, perubahan momen dipol selama vibrasi membuat mode H₂O tampak dalam spektrum IR.

11. Analisis CO₂: Mode Linear dan Aktivitas IR

CO₂ penting karena menunjukkan bahwa molekul nonpolar pada keadaan setimbang tetap dapat memiliki mode IR aktif. CO₂ berbentuk linear dan tidak memiliki momen dipol permanen. Namun, mode vibrasi tertentu dapat menghasilkan perubahan momen dipol sesaat.

Mode penting CO₂ meliputi:

1. Regangan simetris.
2. Regangan antisimetri.
3. Bending degenerat.

Regangan simetris CO₂ tidak menghasilkan perubahan momen dipol secara signifikan sehingga dapat tidak aktif IR. Regangan antisimetri menghasilkan perubahan momen dipol sehingga aktif IR. Mode bending juga dapat menghasilkan momen dipol sesaat.

Analisis CO₂:

CO₂

- nonpolar pada keadaan setimbang
- tidak semua mode IR aktif
- mode yang mengubah momen dipol aktif IR
- regangan antisimetri dan bending penting dalam IR

Contoh paragraf laporan:

Spektrum IR simulasi CO_2 memperlihatkan bahwa aktivitas IR tidak ditentukan semata-mata oleh momen dipol permanen. CO_2 tidak memiliki momen dipol permanen karena strukturnya linear dan simetris, tetapi mode antisimetri dan bending dapat aktif IR karena menyebabkan perubahan momen dipol selama vibrasi.

Analisis ini penting untuk menghindari kesalahan umum bahwa molekul nonpolar tidak memiliki spektrum IR.

12. Analisis NH_3 : N–H Stretching dan Bending

NH_3 memiliki enam mode vibrasi karena terdiri atas empat atom dan berbentuk nonlinier. Mode yang penting adalah stretching N–H dan bending H–N–H. Karena melibatkan atom H, stretching N–H muncul pada daerah frekuensi tinggi. Bending H–N–H muncul lebih rendah.

NH_3 juga memiliki momen dipol permanen karena bentuknya piramidal trigonal. Mode vibrasinya dapat menghasilkan perubahan momen dipol, sehingga beberapa mode aktif IR.

Analisis NH_3 :

NH_3

- 6 mode vibrasi
- N–H stretching frekuensi tinggi
- H–N–H bending lebih rendah
- aktivitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol

Contoh paragraf laporan:

Spektrum IR simulasi NH_3 menunjukkan puncak N–H stretching pada daerah frekuensi tinggi dan mode bending pada daerah lebih rendah. Puncak stretching N–H muncul tinggi karena vibrasi tersebut melibatkan atom H yang ringan. Bentuk piramidal NH_3 memungkinkan perubahan momen dipol selama vibrasi sehingga beberapa mode tampak aktif IR.

NH_3 baik dibandingkan dengan H_2O untuk memahami vibrasi X–H. Keduanya menunjukkan bahwa ikatan dengan H cenderung memiliki frekuensi tinggi, tetapi posisi dan intensitasnya bergantung pada atom pusat dan bentuk molekul.

13. Analisis Formaldehida: Karbonil Sederhana

Formaldehida memiliki gugus $\text{C}=\text{O}$ dan dua ikatan $\text{C}-\text{H}$. Sebagai molekul karbonil sederhana, formaldehida menjadi model penting untuk membaca puncak $\text{C}=\text{O}$. Mode regangan $\text{C}=\text{O}$ biasanya

muncul sebagai puncak kuat karena perubahan panjang ikatan C=O menghasilkan perubahan momen dipol yang besar.

Analisis formaldehida:

Formaldehida
 → memiliki C=O
 → C=O stretch kuat
 → memiliki C-H stretch
 → spektrum relatif sederhana

Contoh paragraf laporan:

Spektrum IR simulasi formaldehida menunjukkan puncak kuat yang dapat ditugaskan sebagai regangan C=O. Puncak ini kuat karena ikatan C=O bersifat polar dan regangannya menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Selain itu, formaldehida juga menunjukkan mode C-H stretching dan bending yang berkaitan dengan gugus CH₂.

Formaldehida membantu mahasiswa memahami puncak karbonil tanpa kompleksitas molekul organik besar. Namun, mahasiswa tetap harus memeriksa mode normal karena beberapa mode dapat melibatkan gerak atom lain selain C=O.

14. Analisis Etanol: O–H, C–H, dan C–O

Etanol memiliki spektrum lebih kompleks karena memiliki 21 mode vibrasi. Molekul ini mengandung O–H, C–H, C–O, C–C, serta berbagai mode bending dan torsional. Oleh karena itu, analisis etanol harus dilakukan secara hati-hati.

Puncak penting etanol:

1. O–H stretching pada frekuensi tinggi.
2. C–H stretching pada daerah regangan C–H.
3. C–O stretching pada daerah lebih rendah.
4. Mode bending dan fingerprint region.

Analisis etanol:

Etanol
 → O–H stretch
 → C–H stretch
 → C–O stretch
 → banyak mode fingerprint

Contoh paragraf laporan:

Spektrum IR simulasi etanol menunjukkan beberapa puncak penting. Puncak O-H muncul pada daerah frekuensi tinggi karena melibatkan atom H yang ringan dan ikatan O-H yang cukup kuat. Puncak C-H muncul pada daerah regangan C-H, sedangkan C-O muncul pada daerah lebih rendah. Karena etanol memiliki 21 mode vibrasi, spektrumnya lebih kompleks dan beberapa mode dapat bercampur, terutama pada daerah fingerprint.

Etanol juga penting untuk membahas perbedaan komputasi dan eksperimen. Dalam model molekul tunggal, O-H etanol sering tampak lebih tajam. Dalam eksperimen cairan, O-H dapat melebar akibat ikatan hidrogen. Mahasiswa harus menyebut hal ini jika membandingkan hasil komputasi dengan spektrum eksperimen.

15. Analisis Aseton: C=O Keton dan Mode CH₃

Aseton memiliki gugus karbonil C=O dan dua gugus metil. Jumlah mode vibrasinya 24, sehingga spektrumnya lebih kompleks daripada formaldehida. Puncak yang paling penting adalah regangan C=O keton. Selain itu, terdapat mode C-H stretching dan bending dari gugus CH₃.

Analisis aseton:

Aseton
 → C=O keton
 → puncak C=O kuat
 → banyak mode CH₃
 → spektrum organik kompleks

Contoh paragraf laporan:

Spektrum IR simulasi aseton menunjukkan puncak kuat pada daerah karbonil yang ditugaskan sebagai regangan C=O. Intensitas puncak ini besar karena vibrasi C=O menghasilkan perubahan momen dipol yang signifikan. Selain puncak karbonil, aseton juga memiliki puncak C-H stretching dan bending yang berasal dari dua gugus metil.

Aseton sangat baik dibandingkan dengan formaldehida karena keduanya memiliki C=O tetapi lingkungan karbonil berbeda. Aseton juga baik dibandingkan dengan etanol karena keduanya mengandung C, H, dan O, tetapi gugus fungsinya berbeda. Etanol menunjukkan O-H dan C-O, sedangkan aseton menunjukkan C=O.

16. Perbandingan Etanol dan Aseton

Perbandingan etanol dan aseton merupakan analisis penting dalam Praktikum 6. Keduanya adalah molekul organik kecil yang mengandung C, H, dan O, tetapi gugus fungsinya berbeda. Etanol adalah alkohol, sedangkan aseton adalah keton.

Perbandingan utama:

Aspek	Etanol	Aseton
Gugus fungsi utama	O–H dan C–O	C=O
Puncak khas	O–H, C–O	C=O kuat
Jenis senyawa	Alkohol	Keton
Jumlah mode vibrasi	21	24
Fokus analisis	Alkohol dan ikatan hidrogen	Karbonil keton

Analisis perbandingan:

Etanol menunjukkan puncak yang berkaitan dengan O–H dan C–O, sedangkan aseton menunjukkan puncak kuat C=O. Perbedaan ini menunjukkan bahwa spektrum IR dapat digunakan untuk membedakan alkohol dan keton. Meskipun keduanya mengandung atom C, H, dan O, susunan ikatan dan gugus fungsi menyebabkan pola spektrum berbeda.

Perbandingan ini penting secara pedagogis karena mahasiswa belajar bahwa rumus unsur saja tidak cukup untuk memahami spektrum. Struktur dan gugus fungsi menentukan pola IR.

17. Perbandingan Formaldehida dan Aseton

Formaldehida dan aseton sama-sama memiliki gugus C=O. Karena itu, keduanya seharusnya menunjukkan puncak karbonil. Namun, lingkungan karbonilnya berbeda. Formaldehida memiliki karbonil yang terikat pada H, sedangkan aseton memiliki karbonil yang terikat pada dua gugus metil.

Perbandingan:

Aspek	Formaldehida	Aseton
Gugus utama	C=O aldehida sederhana	C=O keton
Jumlah atom	4	10
Jumlah mode	6	24
Spektrum	Lebih sederhana	Lebih kompleks
Puncak penting	C=O, C–H	C=O, C–H, CH ₃ bending

Contoh analisis:

Formaldehida dan aseton sama-sama memiliki puncak C=O karena keduanya mengandung gugus karbonil. Namun, spektrum aseton lebih kompleks karena memiliki lebih banyak atom dan dua gugus metil. Perbedaan lingkungan karbonil juga dapat menyebabkan pergeseran frekuensi C=O.

Analisis ini membantu mahasiswa memahami bahwa satu gugus fungsi yang sama dapat muncul pada daerah yang mirip, tetapi tidak selalu pada posisi identik.

18. Hubungan Intensitas C=O dengan Perubahan Momen Dipol

Salah satu pertanyaan penting dalam analisis IR adalah mengapa C=O sering muncul kuat. Jawabannya berkaitan dengan perubahan momen dipol. Ikatan C=O sangat polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada karbon. Ketika ikatan C=O meregang, distribusi muatan berubah cukup besar. Perubahan ini menghasilkan perubahan momen dipol yang besar, sehingga intensitas IR menjadi kuat.

Secara konseptual:

C=O polar
 → saat stretching, panjang ikatan berubah
 → momen dipol berubah signifikan
 → intensitas IR kuat

Pernyataan laporan yang baik:

Puncak C=O pada formaldehida dan aseton memiliki intensitas besar karena mode regangan karbonil menyebabkan perubahan momen dipol yang signifikan. Hal ini sesuai dengan prinsip bahwa intensitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi.

Analisis ini menunjukkan bahwa mahasiswa tidak hanya menghafal “C=O kuat”, tetapi memahami penyebab fisiknya.

19. Hubungan O–H dengan Frekuensi Tinggi

O–H muncul pada frekuensi tinggi karena dua alasan utama. Pertama, atom H memiliki massa kecil. Kedua, ikatan O–H relatif kuat. Dalam model osilator harmonik, frekuensi meningkat jika konstanta gaya besar dan massa tereduksi kecil.

Secara konseptual:

O–H
 → massa H kecil
 → massa tereduksi kecil
 → frekuensi tinggi

Pernyataan laporan yang baik:

Puncak O–H muncul pada frekuensi tinggi karena vibrasi O–H melibatkan atom H yang ringan dan ikatan O–H yang relatif kuat. Kombinasi massa tereduksi kecil dan konstanta gaya besar menyebabkan frekuensi vibrasi O–H tinggi.

Analisis ini akan menjadi dasar untuk menjawab pertanyaan diskusi pada subbab 9.10.

20. Hubungan C–O dan C=O

C–O dan C=O sama-sama melibatkan karbon dan oksigen, tetapi frekuensinya berbeda. C=O adalah ikatan rangkap, sedangkan C–O adalah ikatan tunggal. Ikatan rangkap memiliki konstanta gaya lebih besar sehingga frekuensi regangannya lebih tinggi.

Perbandingan:

Ikatan	Jenis	Kekuatan Relatif	Frekuensi Relatif
C–O	Ikatan tunggal	Lebih rendah	Lebih rendah
C=O	Ikatan rangkap	Lebih tinggi	Lebih tinggi

Contoh analisis:

Puncak C–O pada etanol muncul pada frekuensi lebih rendah daripada puncak C=O pada formaldehida dan aseton karena C–O merupakan ikatan tunggal, sedangkan C=O merupakan ikatan rangkap dengan konstanta gaya lebih besar.

Analisis ini membantu mahasiswa memahami bahwa jenis ikatan memengaruhi posisi puncak IR.

21. Daerah Fingerprint dan Keterbatasan Penugasan

Daerah di bawah sekitar 1500 cm^{-1} sering disebut daerah fingerprint. Pada daerah ini banyak mode vibrasi muncul, terutama bending, wagging, rocking, twisting, dan mode rangka molekul. Dalam molekul organik seperti etanol dan aseton, daerah fingerprint dapat sangat kompleks.

Mahasiswa harus berhati-hati menugaskan puncak pada daerah ini. Puncak pada daerah fingerprint tidak selalu dapat dikaitkan dengan satu ikatan tunggal secara sederhana. Satu mode dapat melibatkan beberapa atom dan beberapa jenis gerakan sekaligus.

Pernyataan yang baik:

Puncak pada daerah fingerprint ditafsirkan secara hati-hati karena mode vibrasi pada daerah ini dapat melibatkan beberapa gerak atom sekaligus. Penugasan awal dapat dibuat berdasarkan rentang frekuensi, tetapi konfirmasi mode normal diperlukan untuk penugasan yang lebih kuat.

Pernyataan yang kurang baik:

Semua puncak di bawah 1500 cm^{-1} adalah C–O.

Pernyataan tersebut salah karena daerah fingerprint mencakup banyak mode berbeda.

22. Analisis Frekuensi Imajiner sebelum Interpretasi Puncak

Sebelum menganalisis puncak IR, mahasiswa harus memastikan tidak ada frekuensi imajiner. Jika terdapat frekuensi imajiner pada molekul stabil, struktur belum dapat dianggap sebagai minimum lokal. Dalam kondisi tersebut, interpretasi puncak IR harus ditunda sampai struktur diperbaiki.

Alur validasi:

```

periksa output frekuensi
→ jika tidak ada frekuensi imajiner
→ lanjut analisis puncak IR

jika ada frekuensi imajiner
→ optimasi ulang
→ jangan langsung menafsirkan spektrum
  
```

Contoh kalimat laporan:

Tidak ditemukan frekuensi imajiner pada output, sehingga struktur dapat dianggap sebagai minimum lokal pada tingkat teori yang digunakan. Oleh karena itu, puncak IR dapat dianalisis lebih lanjut.

Jika ada frekuensi imajiner:

Karena output menunjukkan frekuensi imajiner, struktur belum valid sebagai minimum lokal. Interpretasi puncak IR perlu ditunda sampai optimasi geometri diperbaiki.

Validasi ini penting karena spektrum IR dari struktur yang belum minimum dapat menyesatkan.

23. Analisis Frekuensi Komputasi dan Faktor Skala

Frekuensi yang dianalisis sebaiknya adalah frekuensi yang telah dikoreksi dengan faktor skala. Namun, frekuensi komputasi asli tetap harus disimpan. Faktor skala digunakan karena frekuensi harmonik komputasi sering berbeda dari frekuensi eksperimen akibat pendekatan harmonik, keterbatasan metode, basis set, dan efek lingkungan.

Rumus:

$$v_{\text{terkoreksi}} = s \times v_{\text{komputasi}}$$

Analisis yang baik harus menyebut:

1. Frekuensi asli.

2. Faktor skala.
3. Frekuensi terkoreksi.
4. Penugasan puncak.
5. Alasan kimia penugasan.

Contoh:

Frekuensi C=O komputasi dikoreksi menggunakan faktor skala 0,96. Setelah koreksi, puncak tetap berada pada daerah karbonil dan memiliki intensitas tinggi, sehingga ditugaskan sebagai regangan C=O dominan.

Pernyataan ini menunjukkan transparansi metodologis.

24. Analisis Kritis terhadap Spektrum Komputasi

Spektrum IR komputasi harus ditafsirkan secara kritis. Ada beberapa alasan mengapa spektrum komputasi dapat berbeda dari spektrum eksperimen.

Pertama, perhitungan sering menggunakan pendekatan harmonik, sedangkan vibrasi molekul nyata bersifat anharmonik. Kedua, perhitungan sering dilakukan untuk molekul tunggal dalam fase gas, sedangkan eksperimen dapat dilakukan pada cairan, padatan, larutan, atau fase gas. Ketiga, ikatan hidrogen dan interaksi antarmolekul dapat menggeser atau melebarkan puncak. Keempat, metode dan basis set memengaruhi hasil frekuensi dan intensitas. Kelima, parameter pelebaran dalam simulasi spektrum memengaruhi bentuk grafik.

Contoh pada etanol sangat penting. Spektrum komputasi molekul etanol tunggal dapat menunjukkan O–H yang tajam. Spektrum eksperimen etanol cair dapat menunjukkan O–H yang melebar karena ikatan hidrogen. Jika mahasiswa membandingkan keduanya tanpa mempertimbangkan fase dan model, analisisnya dapat keliru.

Pernyataan kritis:

Perbedaan antara spektrum komputasi dan spektrum eksperimen dapat disebabkan oleh pendekatan harmonik, faktor skala, metode komputasi, basis set, serta efek lingkungan seperti ikatan hidrogen. Oleh karena itu, spektrum komputasi digunakan sebagai alat interpretasi dan prediksi, bukan sebagai salinan sempurna spektrum eksperimen.

Analisis kritis seperti ini menunjukkan kedewasaan ilmiah.

25. Format Analisis dalam Laporan Praktikum

Analisis laporan Praktikum 6 dapat disusun dengan format berikut:

1. Menyebutkan molekul yang dianalisis.
2. Menyebutkan jumlah mode vibrasi.
3. Menyebutkan apakah ada frekuensi imajiner.
4. Menyajikan puncak utama.
5. Menyebutkan frekuensi komputasi dan frekuensi terkoreksi.
6. Menjelaskan intensitas IR.
7. Menugaskan puncak berdasarkan jenis ikatan.
8. Menghubungkan puncak dengan mode normal.
9. Membandingkan dengan molekul lain.
10. Menyebutkan keterbatasan analisis.

Contoh format ringkas:

Molekul:
 Jumlah mode vibrasi:
 Frekuensi imajiner:
 Puncak utama:
 Penugasan mode:
 Alasan penugasan:
 Catatan kritis:

Contoh paragraf analisis:

Aseton memiliki 24 mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan 10 atom. Output tidak menunjukkan frekuensi imajiner, sehingga struktur dapat dianggap sebagai minimum lokal. Puncak utama pada daerah karbonil memiliki intensitas tinggi dan ditugaskan sebagai regangan C=O. Penugasan ini didukung oleh karakter C=O yang polar dan kuat, sehingga regangannya menghasilkan perubahan momen dipol yang besar. Selain itu, spektrum aseton juga menunjukkan puncak C-H yang berasal dari gugus metil.

Paragraf tersebut menggabungkan jumlah mode, validasi struktur, puncak utama, intensitas, penugasan, dan alasan kimia.

26. Kesalahan Umum dalam Analisis Puncak IR

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Mengapa Salah
Menugaskan puncak hanya berdasarkan angka	Mode normal belum diperiksa
Mengabaikan intensitas IR	Puncak kuat dan lemah tidak dibedakan
Tidak menerapkan faktor skala	Frekuensi komputasi mentah dapat bergeser
Tidak menyebut frekuensi imajiner	Validitas struktur tidak jelas
Menganggap molekul nonpolar tidak aktif IR	Aktivitas IR bergantung pada perubahan momen dipol

Menyebut semua puncak tinggi sebagai O–H	N–H dan C–H juga berada pada daerah tinggi
Menganggap C=O selalu pada frekuensi identik	Lingkungan kimia dapat menggeser frekuensi
Menganggap daerah fingerprint mudah ditafsirkan	Mode di daerah ini kompleks
Membandingkan komputasi dan eksperimen tanpa konteks	Fase dan lingkungan dapat berbeda
Tidak menyimpan CSV dan output	Analisis tidak reproduibel

Kesalahan tersebut menunjukkan bahwa interpretasi IR memerlukan kehati-hatian. Mahasiswa harus memadukan teori, data, dan visualisasi mode.

27. Implikasi Keilmuan Analisis IR

Analisis IR memiliki implikasi keilmuan yang luas. Pertama, analisis ini menunjukkan bahwa spektrum adalah jendela untuk melihat gerak molekul. Puncak IR bukan sekadar tanda gugus fungsi, melainkan bukti adanya mode vibrasi yang aktif IR.

Kedua, analisis IR menghubungkan struktur molekul dengan sifat spektroskopi. Ikatan O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O menghasilkan puncak berbeda karena perbedaan massa, kekuatan ikatan, polaritas, dan perubahan momen dipol.

Ketiga, analisis IR memperlihatkan pentingnya kimia komputasi dalam interpretasi eksperimen. Dengan komputasi, mahasiswa dapat melihat mode normal dan memahami puncak yang sulit ditugaskan hanya dari tabel.

Keempat, analisis IR mengajarkan bahwa model memiliki keterbatasan. Faktor skala, pendekatan harmonik, dan efek lingkungan harus dipertimbangkan. Ini membentuk sikap ilmiah yang kritis.

Kelima, analisis IR menjadi dasar untuk topik lanjutan seperti spektroskopi Raman, vibrasi anharmonik, termokimia, energi bebas, keadaan transisi, dan dinamika molekul.

28. Implikasi Pedagogis Analisis Puncak IR

Secara pedagogis, analisis puncak IR membantu mahasiswa mengembangkan beberapa kemampuan penting.

Pertama, mahasiswa belajar membaca spektrum sebagai data ilmiah. Mereka tidak hanya melihat grafik, tetapi memahami makna puncak.

Kedua, mahasiswa belajar menghubungkan konsep mekanika vibrasi dengan kimia gugus fungsi. O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O tidak lagi dipahami sebagai daftar hafalan, tetapi sebagai ikatan yang memiliki karakter massa, kekuatan, dan perubahan momen dipol.

Ketiga, mahasiswa belajar berpikir komparatif. Mereka membandingkan H₂O dengan NH₃, formaldehida dengan aseton, dan etanol dengan aseton.

Keempat, mahasiswa belajar berpikir kritis terhadap output komputasi. Mereka memeriksa frekuensi imajiner, faktor skala, intensitas, dan mode normal.

Kelima, mahasiswa belajar menyusun laporan berbasis data. CSV, grafik, tabel puncak utama, dan output komputasi menjadi dasar penulisan analisis.

Dengan demikian, Praktikum 6 tidak hanya melatih keterampilan teknis, tetapi juga membentuk pola pikir ilmiah dalam membaca spektrum.

29. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Subbab 9.9 telah membahas analisis puncak IR dan hubungannya dengan jenis ikatan seperti O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O. Pembahasan ini menunjukkan bahwa posisi puncak ditentukan oleh kekuatan ikatan dan massa atom, sedangkan intensitas IR ditentukan oleh perubahan momen dipol selama vibrasi. O–H dan N–H muncul pada frekuensi tinggi karena melibatkan atom H yang ringan. C=O sering muncul kuat karena ikatan karbonil polar dan regangannya menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. C–O muncul pada frekuensi lebih rendah daripada C=O karena merupakan ikatan tunggal. Daerah fingerprint harus dianalisis hati-hati karena banyak mode dapat bercampur.

Subbab berikutnya akan membahas pertanyaan diskusi. Pertanyaan tersebut akan menguji pemahaman mahasiswa tentang arti frekuensi imajiner, alasan O–H muncul pada frekuensi tinggi, alasan C=O sering muncul kuat pada IR, dan alasan frekuensi komputasi perlu faktor skala. Dengan demikian, subbab 9.10 akan menjadi ruang refleksi untuk memastikan bahwa mahasiswa tidak hanya mampu membuat spektrum IR simulasi, tetapi juga mampu menjelaskan makna kimianya secara benar.

9.10 Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 6 berfungsi untuk menguji apakah mahasiswa benar-benar memahami hubungan antara **frekuensi vibrasi, mode normal, intensitas IR, frekuensi imajiner, faktor skala, dan interpretasi gugus fungsi**. Pada tahap ini, mahasiswa tidak cukup hanya menampilkan spektrum IR simulasi atau tabel frekuensi. Mahasiswa harus mampu menjelaskan mengapa suatu puncak muncul, apa makna fisiknya, bagaimana hubungannya dengan struktur molekul, dan mengapa hasil komputasi perlu ditafsirkan secara kritis.

Pertanyaan diskusi Praktikum 6 adalah:

1. Apa arti frekuensi imajiner?
2. Mengapa O–H muncul pada frekuensi tinggi?
3. Mengapa C=O sering muncul kuat pada IR?
4. Mengapa frekuensi komputasi perlu faktor skala?

Keempat pertanyaan tersebut mencerminkan inti Praktikum 6. Pertanyaan pertama berhubungan dengan validasi geometri hasil optimasi. Pertanyaan kedua berhubungan dengan teori osilator harmonik, massa atom, dan kekuatan ikatan. Pertanyaan ketiga berhubungan dengan intensitas IR dan perubahan momen dipol selama vibrasi. Pertanyaan keempat berhubungan dengan keterbatasan pendekatan harmonik dan perlunya koreksi empiris terhadap frekuensi komputasi.

Pertanyaan diskusi ini harus dijawab dengan menghubungkan **teori, output komputasi, data frekuensi, intensitas IR, spektrum simulasi, dan mode normal**. Jawaban yang hanya berupa hafalan singkat belum cukup. Mahasiswa harus menjelaskan hubungan sebab-akibat secara ilmiah.

1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum 6

Pertanyaan diskusi memiliki fungsi penting dalam pembelajaran kimia komputasi. Praktikum 6 menghasilkan banyak output, seperti tabel frekuensi, intensitas IR, spektrum simulasi, daftar puncak utama, dan file CSV. Namun, semua output tersebut belum bermakna jika mahasiswa tidak dapat menjelaskan dasar fisiknya.

Pertanyaan diskusi berfungsi untuk:

1. Menguji pemahaman mahasiswa tentang validasi geometri.
2. Menguji pemahaman tentang frekuensi imajiner.
3. Menguji hubungan kekuatan ikatan dengan frekuensi vibrasi.
4. Menguji hubungan massa atom dengan frekuensi vibrasi.
5. Menguji hubungan perubahan momen dipol dengan intensitas IR.
6. Menguji pemahaman tentang keterbatasan frekuensi harmonik.
7. Menguji kemampuan menggunakan faktor skala secara bertanggung jawab.
8. Menguji kemampuan menghubungkan output komputasi dengan konsep spektroskopi.
9. Menguji kemampuan menulis argumentasi ilmiah berbasis data.

Secara pedagogis, pertanyaan diskusi membantu mahasiswa berpindah dari kegiatan teknis menuju pemahaman konseptual. Mahasiswa tidak hanya menjalankan software, tetapi harus memahami apa yang dihitung, mengapa dihitung, dan bagaimana hasilnya ditafsirkan.

2. Prinsip Umum Menjawab Pertanyaan Diskusi

Jawaban pertanyaan diskusi harus disusun dengan pola ilmiah. Mahasiswa dianjurkan menggunakan alur berikut:

definisi konsep
 → teori pendukung
 → hubungan dengan output praktikum
 → contoh molekul model
 → analisis kritis
 → kesimpulan

Jawaban yang baik tidak hanya menyatakan hasil, tetapi menjelaskan penyebabnya. Misalnya, untuk pertanyaan “Mengapa O–H muncul pada frekuensi tinggi?”, jawaban yang baik tidak cukup menyatakan “karena O–H kuat”. Jawaban harus menyebut bahwa frekuensi vibrasi dipengaruhi oleh konstanta gaya dan massa tereduksi. O–H memiliki konstanta gaya cukup besar dan melibatkan atom H yang ringan, sehingga frekuensinya tinggi.

Demikian pula, untuk pertanyaan “Mengapa C=O sering muncul kuat pada IR?”, jawaban tidak cukup menyatakan “karena C=O adalah gugus karbonil”. Jawaban harus menjelaskan bahwa intensitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi. Regangan C=O menyebabkan perubahan momen dipol yang besar karena ikatan C=O polar, sehingga puncaknya kuat.

3. Pertanyaan Diskusi 1: Apa Arti Frekuensi Imajiner?

Pertanyaan pertama berbunyi:

Apa arti frekuensi imajiner?

Frekuensi imajiner adalah frekuensi yang muncul ketika struktur molekul tidak berada pada minimum energi sejati pada semua arah koordinat. Dalam banyak output software, frekuensi imajiner sering ditampilkan sebagai nilai negatif. Secara matematis, nilai tersebut muncul karena terdapat nilai eigen negatif pada matriks Hessian. Jika nilai eigen negatif diambil akar kuadratnya, hasilnya bersifat imajiner. Oleh karena itu, istilah yang lebih tepat adalah **frekuensi imajiner**, meskipun output sering menampilkannya sebagai angka negatif.

Dalam perhitungan frekuensi, Hessian menggambarkan kelengkungan permukaan energi potensial di sekitar geometri molekul. Jika kelengkungan positif, struktur stabil terhadap perpindahan kecil pada arah tersebut. Jika kelengkungan negatif, energi justru menurun ketika molekul bergerak sepanjang arah tersebut. Kelengkungan negatif inilah yang menghasilkan frekuensi imajiner.

Secara konseptual:

kelengkungan energi positif
 → frekuensi nyata
 → arah vibrasi stabil

kelengkungan energi negatif
 → frekuensi imajiner
 → struktur belum minimum pada arah tersebut

Dalam Praktikum 6, molekul model seperti H_2O , CO_2 , NH_3 , formaldehida, etanol, dan aseton diperlakukan sebagai molekul stabil. Oleh karena itu, struktur hasil optimasi seharusnya tidak memiliki frekuensi imajiner. Jika output menunjukkan frekuensi imajiner, mahasiswa harus memeriksa ulang struktur, status optimasi, metode, basis set, dan kemungkinan kesalahan input.

4. Frekuensi Imajiner sebagai Alat Validasi Geometri

Frekuensi imajiner memiliki fungsi penting sebagai alat validasi geometri. Optimasi geometri bertujuan mencari struktur dengan energi minimum. Namun, pernyataan bahwa optimasi telah selesai belum cukup. Struktur hasil optimasi perlu diperiksa melalui perhitungan frekuensi.

Jika semua frekuensi nyata, struktur dapat dianggap sebagai minimum lokal pada tingkat teori yang digunakan. Jika terdapat frekuensi imajiner, struktur tidak boleh langsung digunakan untuk interpretasi spektrum IR molekul stabil.

Alur validasi:

```
optimasi geometri
→ perhitungan frekuensi
→ periksa frekuensi imajiner
→ jika tidak ada, lanjut interpretasi spektrum
→ jika ada, perbaiki struktur atau optimasi ulang
```

Dalam studi reaksi, satu frekuensi imajiner dapat menunjukkan keadaan transisi orde pertama. Namun, dalam Praktikum 6, mahasiswa tidak sedang mencari keadaan transisi. Karena itu, adanya frekuensi imajiner pada molekul stabil harus diperlakukan sebagai tanda bahwa struktur belum valid untuk analisis IR.

Contoh jawaban yang baik:

Frekuensi imajiner menunjukkan bahwa struktur molekul belum berada pada minimum energi sejati pada semua arah koordinat. Secara komputasi, frekuensi imajiner muncul karena terdapat kelengkungan negatif pada permukaan energi potensial, atau nilai eigen negatif pada matriks Hessian. Untuk molekul stabil seperti H_2O , CO_2 , NH_3 , formaldehida, etanol, dan aseton, frekuensi imajiner menandakan bahwa optimasi geometri perlu diperiksa atau diulang sebelum spektrum IR ditafsirkan.

Jawaban tersebut baik karena menjelaskan makna matematis, makna fisik, dan implikasi praktikum.

Jawaban yang kurang tepat:

Frekuensi imajiner adalah frekuensi yang salah.

Jawaban ini terlalu sederhana. Frekuensi imajiner bukan sekadar “salah”, tetapi merupakan informasi penting tentang bentuk permukaan energi potensial dan validitas struktur.

5. Contoh Kasus Frekuensi Imajiner

Misalnya, mahasiswa menghitung etanol dan memperoleh satu frekuensi imajiner kecil. Dalam kasus ini, mahasiswa tidak boleh langsung membuat kesimpulan bahwa etanol memiliki mode vibrasi imajiner dalam spektrum IR. Mahasiswa harus memeriksa apakah struktur etanol sudah mencapai konformasi minimum.

Kemungkinan penyebab frekuensi imajiner pada etanol:

1. Optimasi belum konvergen.
2. Konformasi awal kurang baik.
3. Rotasi gugus O–H belum mencapai minimum.
4. Struktur memiliki mode torsional lunak.
5. Kriteria konvergensi belum terpenuhi.
6. Perhitungan frekuensi dilakukan pada struktur yang salah.

Contoh catatan analisis:

Output etanol menunjukkan satu frekuensi imajiner. Hal ini mengindikasikan bahwa struktur belum dapat dipastikan sebagai minimum lokal. Oleh karena itu, optimasi geometri perlu diulang atau konformasi awal perlu diperbaiki sebelum spektrum IR dianalisis.

Pernyataan ini lebih baik daripada tetap menafsirkan spektrum tanpa validasi. Dalam kimia komputasi, pemeriksaan frekuensi imajiner merupakan bagian dari sikap ilmiah.

6. Pertanyaan Diskusi 2: Mengapa O–H Muncul pada Frekuensi Tinggi?

Pertanyaan kedua berbunyi:

Mengapa O–H muncul pada frekuensi tinggi?

Ikatan O–H muncul pada frekuensi tinggi karena dua alasan utama. Pertama, ikatan O–H relatif kuat sehingga memiliki konstanta gaya besar. Kedua, vibrasi O–H melibatkan atom H yang sangat ringan sehingga massa tereduksinya kecil. Dalam model osilator harmonik, frekuensi vibrasi berbanding lurus dengan akar konstanta gaya dan berbanding terbalik dengan akar massa tereduksi.

Hubungan konseptualnya adalah:

$$\nu \propto \sqrt{(k / \mu)}$$

dengan:

ν = frekuensi vibrasi
 k = konstanta gaya ikatan
 μ = massa tereduksi

Jika k besar, frekuensi meningkat. Jika μ kecil, frekuensi juga meningkat. Ikatan O–H memenuhi dua kondisi tersebut: ikatannya cukup kuat dan atom H sangat ringan.

Secara ringkas:

O–H
 → ikatan relatif kuat
 → konstanta gaya besar

O–H
 → melibatkan H
 → massa tereduksi kecil

konstanta gaya besar + massa tereduksi kecil
 → frekuensi tinggi

Dalam Praktikum 6, puncak O–H dapat diamati pada H₂O dan etanol. Pada H₂O, mode O–H stretching muncul pada frekuensi lebih tinggi daripada bending H–O–H. Pada etanol, O–H stretching juga muncul pada daerah frekuensi tinggi, meskipun dalam eksperimen fase cair puncak O–H dapat melebar akibat ikatan hidrogen.

7. O–H dalam H₂O dan Etanol

Pada H₂O, terdapat dua jenis stretching O–H, yaitu stretching simetris dan antisimetri. Keduanya berada pada daerah frekuensi tinggi karena melibatkan regangan ikatan O–H. Mode bending H–O–H berada pada frekuensi lebih rendah karena pembengkokan sudut membutuhkan energi lebih kecil daripada regangan ikatan.

Pada etanol, O–H juga muncul pada frekuensi tinggi. Namun, puncak O–H etanol perlu ditafsirkan hati-hati. Dalam spektrum komputasi molekul tunggal fase gas, puncak O–H dapat tampak tajam. Dalam spektrum eksperimen etanol cair, puncak O–H sering melebar karena ikatan hidrogen antarmolekul. Hal ini menunjukkan bahwa lingkungan molekul dapat memengaruhi bentuk dan posisi puncak IR.

Contoh jawaban yang baik:

O–H muncul pada frekuensi tinggi karena ikatan O–H relatif kuat dan melibatkan atom H yang ringan. Berdasarkan model osilator harmonik, frekuensi vibrasi meningkat jika konstanta gaya ikatan besar dan massa tereduksi kecil. Pada H₂O

dan etanol, stretching O–H muncul pada daerah frekuensi tinggi, sedangkan mode bending muncul pada frekuensi lebih rendah.

Jawaban ini baik karena menghubungkan O–H dengan teori osilator harmonik dan contoh molekul model.

Jawaban yang kurang tepat:

O–H muncul tinggi karena oksigen sangat elektronegatif.

Jawaban tersebut belum lengkap. Elektronegativitas berkaitan dengan polaritas ikatan dan intensitas IR, tetapi frekuensi terutama dijelaskan oleh kekuatan ikatan dan massa tereduksi.

8. Hubungan O–H dengan Ikatan Hidrogen

Dalam analisis lebih kritis, O–H juga perlu dikaitkan dengan ikatan hidrogen. Ikatan hidrogen dapat melemahkan ikatan O–H efektif dan mengubah lingkungan vibrasi. Akibatnya, puncak O–H dapat bergeser dan melebar pada spektrum eksperimen, terutama pada sampel cair atau padat.

Dalam perhitungan komputasi molekul tunggal, efek ikatan hidrogen antarmolekul biasanya tidak muncul kecuali model secara eksplisit memasukkan beberapa molekul atau pelarut. Karena itu, puncak O–H komputasi dapat berbeda dari puncak O–H eksperimen.

Pernyataan kritis:

Puncak O–H pada spektrum komputasi molekul tunggal dapat tampak lebih tajam daripada spektrum eksperimen fase cair karena model komputasi tidak selalu memasukkan ikatan hidrogen antarmolekul. Dalam eksperimen, ikatan hidrogen dapat menyebabkan puncak O–H melebar dan bergeser.

Analisis ini menunjukkan bahwa mahasiswa memahami keterbatasan model komputasi.

9. Pertanyaan Diskusi 3: Mengapa C=O Sering Muncul Kuat pada IR?

Pertanyaan ketiga berbunyi:

Mengapa C=O sering muncul kuat pada IR?

C=O sering muncul kuat pada spektrum IR karena regangan karbonil menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Intensitas IR suatu mode vibrasi bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi. Jika vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol yang besar, puncaknya kuat. Jika perubahan momen dipol kecil, puncaknya lemah.

Secara teoritis:

$$\text{intensitas IR} \propto (\partial\mu/\partial Q)^2$$

dengan:

μ = momen dipol

Q = koordinat normal vibrasi

Ikatan C=O bersifat polar karena oksigen lebih elektronegatif daripada karbon. Ketika ikatan C=O meregang dan memendek selama vibrasi, distribusi muatan berubah secara signifikan. Perubahan tersebut menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Akibatnya, puncak C=O sering memiliki intensitas tinggi.

Secara konseptual:

C=O polar

- saat stretching, panjang ikatan berubah
- distribusi muatan berubah
- momen dipol berubah besar
- intensitas IR kuat

Dalam Praktikum 6, puncak C=O dianalisis pada formaldehida dan aseton. Formaldehida adalah model karbonil sederhana, sedangkan aseton adalah model keton. Keduanya memiliki gugus C=O dan diharapkan menunjukkan puncak karbonil yang kuat.

10. C=O pada Formaldehida dan Aseton

Formaldehida dan aseton sama-sama memiliki ikatan C=O. Karena itu, keduanya menjadi molekul model yang baik untuk memahami puncak karbonil. Namun, lingkungan C=O pada keduanya berbeda. Pada formaldehida, karbonil terikat pada dua atom H. Pada aseton, karbonil terikat pada dua gugus metil. Perbedaan lingkungan kimia ini dapat memengaruhi posisi frekuensi C=O.

Analisis formaldehida:

Formaldehida

- memiliki C=O sederhana
- regangan C=O kuat
- spektrum relatif sederhana

Analisis aseton:

Aseton

- memiliki C=O keton
- regangan C=O kuat
- spektrum lebih kompleks karena ada gugus metil

Contoh jawaban yang baik:

C=O sering muncul kuat pada spektrum IR karena ikatan C=O bersifat polar dan regangannya menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Intensitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi. Pada formaldehida dan aseton, mode regangan C=O biasanya menjadi puncak penting karena perubahan panjang ikatan karbonil menghasilkan perubahan distribusi muatan yang signifikan.

Jawaban ini baik karena menjelaskan hubungan antara polaritas ikatan, perubahan momen dipol, dan intensitas IR.

Jawaban yang kurang tepat:

C=O kuat karena ikatan rangkap.

Jawaban tersebut belum lengkap. Ikatan rangkap menjelaskan frekuensi relatif tinggi, tetapi intensitas IR yang kuat terutama berkaitan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi.

11. Perbedaan Frekuensi dan Intensitas pada C=O

Mahasiswa harus membedakan dua hal: posisi frekuensi dan intensitas. Ikatan C=O memiliki frekuensi khas karena merupakan ikatan rangkap yang relatif kuat. Namun, puncak C=O sering kuat karena perubahan momen dipol selama stretching besar.

Dengan kata lain:

frekuensi C=O

→ dipengaruhi kekuatan ikatan dan massa atom

intensitas C=O

→ dipengaruhi perubahan momen dipol selama vibrasi

Pernyataan ini penting agar mahasiswa tidak mencampuradukkan alasan posisi puncak dan alasan kuatnya puncak.

Contoh analisis yang baik:

Regangan C=O muncul pada daerah karbonil karena ikatan C=O memiliki konstanta gaya besar sebagai ikatan rangkap. Puncaknya sering kuat karena mode regangan C=O menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Jadi, posisi puncak dan intensitas puncak dijelaskan oleh faktor yang berkaitan tetapi tidak identik.

Analisis tersebut menunjukkan ketelitian konseptual.

12. Pertanyaan Diskusi 4: Mengapa Frekuensi Komputasi Perlu Faktor Skala?

Pertanyaan keempat berbunyi:

Mengapa frekuensi komputasi perlu faktor skala?

Frekuensi komputasi perlu faktor skala karena frekuensi hasil perhitungan biasanya diperoleh dalam pendekatan harmonik dan bergantung pada metode serta basis set yang digunakan. Molekul nyata tidak sepenuhnya harmonik. Selain itu, perhitungan komputasi memiliki keterbatasan model. Akibatnya, frekuensi harmonik komputasi sering tidak sama persis dengan frekuensi eksperimen.

Faktor skala digunakan untuk mengoreksi galat sistematis tersebut. Rumusnya:

$$v_{\text{terkoreksi}} = s \times v_{\text{komputasi}}$$

dengan:

$$\begin{aligned} v_{\text{terkoreksi}} &= \text{frekuensi setelah koreksi} \\ s &= \text{faktor skala} \\ v_{\text{komputasi}} &= \text{frekuensi hasil perhitungan} \end{aligned}$$

Jika faktor skala 0,96 dan frekuensi komputasi 1800 cm^{-1} , maka:

$$\begin{aligned} v_{\text{terkoreksi}} &= 0,96 \times 1800 \\ &= 1728 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

Faktor skala bukan manipulasi sembarangan. Faktor skala merupakan koreksi empiris yang digunakan karena metode komputasi dan pendekatan harmonik memiliki kecenderungan galat tertentu. Dalam praktik ilmiah, faktor skala sebaiknya dipilih berdasarkan metode dan basis set yang digunakan atau mengikuti instruksi praktikum.

13. Penyebab Perbedaan Frekuensi Komputasi dan Eksperimen

Ada beberapa alasan mengapa frekuensi komputasi berbeda dari frekuensi eksperimen.

Pertama, banyak perhitungan menggunakan pendekatan harmonik. Dalam pendekatan harmonik, permukaan energi potensial di sekitar minimum dianggap berbentuk parabola. Molekul nyata bersifat anharmonik, terutama jika vibrasi memiliki amplitudo lebih besar atau ikatan mendekati daerah pemutusan.

Kedua, metode komputasi memiliki keterbatasan. HF, DFT, atau metode lain memiliki galat sistematis masing-masing. Fungsional DFT dan basis set juga memengaruhi hasil frekuensi.

Ketiga, basis set terbatas dapat menghasilkan permukaan energi potensial yang tidak identik dengan realitas.

Keempat, perhitungan sering dilakukan pada molekul tunggal fase gas, sedangkan eksperimen dapat dilakukan pada cairan, padatan, larutan, atau fase gas. Lingkungan dapat menggeser frekuensi.

Kelima, interaksi antarmolekul seperti ikatan hidrogen dapat mengubah frekuensi dan bentuk puncak. Hal ini sangat penting pada O–H etanol atau air.

Keenam, spektrum eksperimen memiliki efek pelebaran puncak, resolusi instrumen, dan kondisi sampel yang tidak selalu dimasukkan dalam simulasi sederhana.

Secara ringkas:

```
pendekatan harmonik
+ keterbatasan metode
+ basis set
+ efek lingkungan
+ anharmonisitas
→ frekuensi komputasi berbeda dari eksperimen
→ diperlukan faktor skala
```

14. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 4

Contoh jawaban yang baik:

Frekuensi komputasi perlu faktor skala karena frekuensi yang dihitung biasanya merupakan frekuensi harmonik dan masih dipengaruhi oleh keterbatasan metode serta basis set. Molekul nyata bersifat anharmonik dan kondisi eksperimen dapat dipengaruhi oleh pelarut, fase, ikatan hidrogen, serta interaksi antarmolekul. Oleh karena itu, frekuensi komputasi sering memiliki galat sistematis terhadap frekuensi eksperimen. Faktor skala digunakan untuk mengoreksi frekuensi komputasi agar lebih mendekati nilai yang realistis.

Jawaban tersebut baik karena menyebut pendekatan harmonik, keterbatasan metode, basis set, lingkungan, dan tujuan faktor skala.

Jawaban yang kurang tepat:

Faktor skala dipakai agar hasilnya sama dengan eksperimen.

Jawaban ini terlalu sederhana. Faktor skala tidak selalu membuat hasil sama persis dengan eksperimen. Faktor skala hanya mengurangi galat sistematis dan membuat frekuensi lebih realistis.

Jawaban yang juga kurang tepat:

Faktor skala digunakan karena software salah.

Pernyataan ini tidak tepat. Perbedaan frekuensi bukan semata-mata karena software salah, tetapi karena model teoritis, pendekatan harmonik, metode, basis set, dan kondisi eksperimen.

15. Hubungan Empat Pertanyaan Diskusi

Keempat pertanyaan diskusi saling berkaitan. Frekuensi imajiner berkaitan dengan validasi geometri. O–H frekuensi tinggi berkaitan dengan massa atom dan kekuatan ikatan. C=O kuat pada IR berkaitan dengan perubahan momen dipol. Faktor skala berkaitan dengan keterbatasan model komputasi.

Hubungan antarkonsep dapat digambarkan sebagai berikut:

```
optimasi geometri
→ frekuensi vibrasi
→ validasi frekuensi imajiner
→ analisis ikatan
→ intensitas IR
→ faktor skala
→ spektrum terkoreksi
→ interpretasi kimia
```

Jika struktur belum valid karena terdapat frekuensi imajiner, analisis O–H, C=O, atau faktor skala menjadi kurang bermakna. Jika frekuensi tidak dikoreksi, posisi puncak dapat kurang sesuai. Jika intensitas tidak dipahami, puncak C=O yang kuat hanya akan menjadi fakta hafalan. Karena itu, keempat pertanyaan harus dipahami sebagai satu kesatuan.

16. Contoh Jawaban Terintegrasi

Mahasiswa dapat menulis jawaban terintegrasi sebagai berikut:

Frekuensi imajiner menunjukkan bahwa struktur hasil optimasi belum berada pada minimum energi sejati pada semua arah koordinat. Dalam output software, frekuensi imajiner sering tampak sebagai frekuensi negatif karena terdapat kelengkungan energi negatif pada matriks Hessian. Untuk molekul stabil, frekuensi imajiner menandakan bahwa struktur perlu dioptimasi ulang sebelum spektrum IR ditafsirkan.

O–H muncul pada frekuensi tinggi karena ikatan O–H relatif kuat dan melibatkan atom H yang ringan. Berdasarkan model osilator harmonik, frekuensi vibrasi meningkat jika konstanta gaya ikatan besar dan massa tereduksi kecil. Oleh karena itu, stretching O–H pada H₂O dan etanol muncul pada daerah frekuensi tinggi.

C=O sering muncul kuat pada IR karena ikatan C=O polar dan regangannya menyebabkan perubahan momen dipol yang besar. Intensitas IR bergantung pada perubahan momen dipol selama vibrasi, sehingga mode regangan C=O pada formaldehida dan aseton sering menghasilkan puncak kuat.

Frekuensi komputasi perlu faktor skala karena umumnya dihitung dalam pendekatan harmonik dan bergantung pada metode serta basis set. Molekul nyata bersifat

anharmonik dan kondisi eksperimen dapat dipengaruhi oleh lingkungan. Faktor skala digunakan untuk mengurangi galat sistematis frekuensi komputasi agar lebih mendekati nilai yang realistis.

Jawaban tersebut menunjukkan keterpaduan antara teori, komputasi, dan interpretasi spektroskopi.

17. Rubrik Penilaian Jawaban Diskusi

Jawaban diskusi dapat dinilai menggunakan rubrik berikut:

Aspek Penilaian	Kriteria Jawaban Baik
Frekuensi imajiner	Menjelaskan hubungan dengan Hessian, kelengkungan negatif, dan validasi geometri
O–H frekuensi tinggi	Menghubungkan dengan konstanta gaya dan massa tereduksi
C=O kuat pada IR	Menghubungkan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi
Faktor skala	Menjelaskan pendekatan harmonik, keterbatasan metode, basis set, dan lingkungan
Contoh molekul	Menggunakan H ₂ O, etanol, formaldehida, dan aseton secara tepat
Bahasa ilmiah	Menggunakan istilah frekuensi, intensitas, mode normal, dan momen dipol dengan benar
Sikap kritis	Menyebut keterbatasan komputasi dan eksperimen
Keterhubungan konsep	Menunjukkan hubungan antara output praktikum dan teori
Ketepatan kesimpulan	Tidak menyederhanakan secara berlebihan
Relevansi laporan	Mengaitkan jawaban dengan hasil spektrum dan tabel praktikum

Rubrik ini membantu mahasiswa memahami bahwa jawaban diskusi bukan sekadar hafalan. Jawaban harus menunjukkan pemahaman teoretis dan keterampilan interpretasi data.

18. Kesalahan Umum dalam Menjawab Pertanyaan Diskusi

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Mengapa Salah
Menganggap frekuensi imajiner sebagai puncak IR biasa	Frekuensi imajiner menunjukkan struktur belum minimum
Mengabaikan frekuensi imajiner	Validitas geometri tidak diperiksa
Menjawab O–H tinggi hanya karena oksigen elektronegatif	Frekuensi terutama dipengaruhi konstanta gaya dan massa tereduksi
Menjawab C=O kuat hanya karena ikatan rangkap	Intensitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol

Menganggap faktor skala sebagai manipulasi data	Faktor skala adalah koreksi empiris terhadap galat sistematis
Menganggap faktor skala selalu sama untuk semua metode	Faktor skala bergantung pada metode dan basis set
Menyamakan frekuensi komputasi dengan eksperimen tanpa koreksi	Mengabaikan pendekatan harmonik dan efek lingkungan
Mengabaikan mode normal	Penugasan puncak menjadi lemah
Tidak menyebut contoh molekul	Jawaban terlalu abstrak
Menulis jawaban satu kalimat tanpa argumentasi	Tidak menunjukkan pemahaman mendalam

Kesalahan tersebut umum terjadi jika mahasiswa hanya menghafal tabel IR tanpa memahami dasar fisiknya.

19. Implikasi Keilmuan Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi Praktikum 6 memiliki implikasi keilmuan yang luas.

Pertama, frekuensi imajiner menunjukkan bahwa perhitungan frekuensi tidak hanya digunakan untuk membuat spektrum, tetapi juga untuk memvalidasi struktur molekul. Ini penting dalam kimia komputasi karena struktur yang tidak valid dapat menghasilkan interpretasi yang salah.

Kedua, pembahasan O–H menunjukkan hubungan antara mekanika vibrasi dan sifat ikatan. Mahasiswa belajar bahwa frekuensi puncak IR dapat dipahami melalui konstanta gaya dan massa tereduksi.

Ketiga, pembahasan C=O menunjukkan bahwa intensitas IR berkaitan dengan perubahan momen dipol. Dengan demikian, mahasiswa memahami bahwa spektrum IR tidak hanya mencerminkan frekuensi gerak, tetapi juga perubahan distribusi muatan selama vibrasi.

Keempat, pembahasan faktor skala menunjukkan bahwa kimia komputasi selalu melibatkan model. Model dapat sangat berguna, tetapi tetap memiliki keterbatasan. Koreksi empiris diperlukan agar hasil lebih sesuai dengan realitas.

Kelima, keempat pertanyaan ini menghubungkan kimia kuantum, spektroskopi, analisis gugus fungsi, dan metodologi komputasi dalam satu kerangka ilmiah.

20. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi

Secara pedagogis, pertanyaan diskusi membantu mahasiswa membangun pemahaman bertingkat.

Pertama, mahasiswa belajar memvalidasi data sebelum menganalisis. Mereka tidak langsung membaca spektrum, tetapi memeriksa frekuensi imajiner terlebih dahulu.

Kedua, mahasiswa belajar menjelaskan puncak IR berdasarkan teori, bukan hafalan. O–H tinggi dijelaskan melalui massa dan kekuatan ikatan. C=O kuat dijelaskan melalui perubahan momen dipol.

Ketiga, mahasiswa belajar membedakan posisi puncak dan intensitas puncak. Posisi puncak berkaitan dengan frekuensi vibrasi, sedangkan intensitas berkaitan dengan perubahan momen dipol.

Keempat, mahasiswa belajar bersikap kritis terhadap hasil komputasi. Faktor skala mengajarkan bahwa output software perlu dikoreksi dan ditafsirkan, bukan diterima mentah-mentah.

Kelima, mahasiswa belajar menyusun jawaban ilmiah berbasis data. Jawaban diskusi harus mengacu pada output praktikum, bukan hanya pada pengetahuan umum.

21. Sintesis Akhir Pertanyaan Diskusi Praktikum 6

Keempat pertanyaan diskusi Praktikum 6 dapat disintesis sebagai berikut:

frekuensi imajiner

→ menilai validitas struktur

O–H frekuensi tinggi

→ menjelaskan pengaruh massa ringan dan ikatan kuat

C=O kuat pada IR

→ menjelaskan perubahan momen dipol besar

faktor skala

→ mengoreksi keterbatasan frekuensi harmonik komputasi

Dengan sintesis ini, mahasiswa dapat memahami bahwa Praktikum 6 bukan sekadar latihan membuat spektrum. Praktikum ini melatih kemampuan membaca struktur, memvalidasi hasil, memahami teori vibrasi, menafsirkan intensitas IR, dan menyadari keterbatasan model komputasi.

22. Transisi ke Penutup Bab 9

Subbab 9.10 telah membahas pertanyaan diskusi Praktikum 6. Pertanyaan tentang frekuensi imajiner menegaskan pentingnya validasi geometri. Pertanyaan tentang O–H menjelaskan hubungan antara massa atom, kekuatan ikatan, dan frekuensi tinggi. Pertanyaan tentang C=O menjelaskan hubungan antara perubahan momen dipol dan intensitas IR. Pertanyaan tentang faktor skala menjelaskan keterbatasan frekuensi harmonik komputasi serta perlunya koreksi empiris.

Dengan demikian, Bab 9 telah membangun pemahaman yang utuh tentang frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi. Mahasiswa tidak hanya mempelajari cara menghasilkan spektrum, tetapi juga cara memvalidasi struktur, membaca mode normal, menafsirkan puncak IR, memahami intensitas, menerapkan faktor skala, dan menyusun analisis ilmiah berbasis data.

Penutup Bab 9

Bab 9 telah membahas Praktikum 6 tentang **frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi**. Bab ini melanjutkan pembahasan Bab 8 yang telah memperkenalkan simetri molekul, kelompok titik, momen dipol, dan hubungan awal antara simetri dengan aktivitas spektrum. Jika Bab 8 menekankan struktur molekul sebagai objek simetris, maka Bab 9 menekankan molekul sebagai sistem dinamis yang atom-atomnya terus bergetar di sekitar posisi kesetimbangan.

Gagasan utama Bab 9 adalah bahwa spektrum IR bukan sekadar grafik atau daftar puncak, melainkan representasi dari **mode vibrasi molekul**. Setiap puncak pada spektrum IR berhubungan dengan gerak atom tertentu yang aktif terhadap radiasi inframerah. Suatu mode vibrasi akan aktif IR jika selama vibrasi terjadi perubahan momen dipol. Dengan demikian, spektrum IR menghubungkan struktur molekul, energi vibrasi, perubahan distribusi muatan, dan sifat spektroskopi.

Bab ini memperkenalkan beberapa konsep dasar yang sangat penting. Pertama, **mode normal** adalah pola gerak kolektif atom-atom dalam molekul pada frekuensi tertentu. Kedua, **frekuensi harmonik** diperoleh dari pendekatan osilator harmonik dan kelengkungan permukaan energi potensial di sekitar titik minimum. Ketiga, **intensitas IR** berkaitan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi. Keempat, **frekuensi imajiner** menjadi alat validasi geometri, karena menunjukkan bahwa struktur belum berada pada minimum energi sejati. Kelima, **faktor skala** digunakan untuk mengoreksi frekuensi komputasi harmonik agar lebih realistis.

Molekul model yang digunakan dalam Bab 9 adalah **H₂O**, **CO₂**, **NH₃**, **formaldehida**, **etanol**, dan **aseton**. H₂O digunakan untuk memahami O–H stretching dan bending. CO₂ digunakan untuk memahami molekul linear dan aktivitas IR pada molekul nonpolar permanen. NH₃ digunakan untuk memahami vibrasi N–H pada molekul piramidal. Formaldehida digunakan sebagai model karbonil sederhana. Etanol digunakan sebagai model alkohol dengan O–H, C–H, dan C–O. Aseton digunakan sebagai model keton dengan puncak C=O yang kuat.

Melalui jalur ChemCompute, mahasiswa belajar menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi. Output yang diperoleh berupa frekuensi vibrasi, intensitas IR, informasi mode normal, dan validasi ada tidaknya frekuensi imajiner. Melalui jalur Python mandiri, mahasiswa belajar mengolah data frekuensi dan intensitas menjadi spektrum IR simulasi, menerapkan faktor skala, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan spektrum dua molekul, dan menyimpan hasil analisis dalam CSV.

Dengan demikian, Bab 9 tidak hanya mengajarkan cara membuat spektrum IR komputasi, tetapi juga melatih mahasiswa untuk membaca, memvalidasi, mengoreksi, menafsirkan, dan mengkritisi hasil komputasi. Praktikum ini membentuk pemahaman bahwa output software harus selalu

dihubungkan dengan teori vibrasi, mode normal, kekuatan ikatan, massa atom, perubahan momen dipol, dan keterbatasan model komputasi.

Rangkuman Bab 9

1. **Frekuensi vibrasi** menunjukkan energi gerak vibrasi molekul dan biasanya dinyatakan dalam satuan cm^{-1} .
2. **Mode normal** adalah pola gerak kolektif atom-atom dalam molekul pada frekuensi tertentu.
3. Jumlah mode vibrasi untuk molekul nonlinier adalah:

$$3N - 6$$

4. Jumlah mode vibrasi untuk molekul linear adalah:

$$3N - 5$$

5. H_2O memiliki tiga mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan tiga atom.
6. CO_2 memiliki empat mode vibrasi karena merupakan molekul linear dengan tiga atom.
7. NH_3 memiliki enam mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan empat atom.
8. Formaldehida memiliki enam mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan empat atom.
9. Etanol memiliki 21 mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan sembilan atom.
10. Aseton memiliki 24 mode vibrasi karena merupakan molekul nonlinier dengan sepuluh atom.
11. **Frekuensi harmonik** diperoleh dari pendekatan osilator harmonik di sekitar geometri minimum.
12. Dalam model osilator harmonik, frekuensi vibrasi meningkat jika konstanta gaya ikatan besar dan massa tereduksi kecil.
13. Ikatan O–H muncul pada frekuensi tinggi karena melibatkan atom H yang ringan dan ikatan O–H relatif kuat.
14. Ikatan N–H juga muncul pada frekuensi tinggi karena melibatkan atom H yang ringan.
15. Ikatan C–H muncul pada daerah regangan C–H karena juga melibatkan atom H.
16. Ikatan C=O sering muncul sebagai puncak kuat karena regangan karbonil menghasilkan perubahan momen dipol yang besar.
17. Ikatan C–O muncul pada frekuensi lebih rendah daripada C=O karena C–O merupakan ikatan tunggal.
18. **Intensitas IR** berkaitan dengan perubahan momen dipol selama vibrasi.
19. Molekul nonpolar permanen tetap dapat memiliki mode IR aktif jika vibrasi menyebabkan perubahan momen dipol sesaat.
20. CO_2 menjadi contoh penting bahwa molekul nonpolar pada keadaan setimbang dapat memiliki mode IR aktif.

21. **Frekuensi imajiner** menunjukkan adanya kelengkungan negatif pada permukaan energi potensial dan menandakan struktur belum menjadi minimum lokal.
22. Untuk molekul stabil dalam Praktikum 6, output seharusnya tidak memiliki frekuensi imajiner.
23. **Faktor skala** digunakan untuk mengoreksi frekuensi komputasi harmonik.
24. Faktor skala diperlukan karena pendekatan harmonik, keterbatasan metode, basis set, dan efek lingkungan dapat menyebabkan frekuensi komputasi berbeda dari eksperimen.
25. Python digunakan untuk membuat spektrum IR simulasi, menerapkan faktor skala, mengidentifikasi puncak utama, membandingkan spektrum, dan menyimpan file CSV.

Sintesis Gagasan Utama Bab 9

Bab 9 menyatukan beberapa konsep besar dalam kimia kuantum praktis dan spektroskopi. Hubungan konseptualnya dapat diringkas sebagai berikut:

```
struktur molekul
→ optimasi geometri
→ Hessian
→ mode normal
→ frekuensi vibrasi
→ intensitas IR
→ spektrum simulasi
→ penugasan gugus fungsi
→ analisis kimia
```

Alur tersebut menunjukkan bahwa spektrum IR tidak berdiri sendiri. Spektrum IR merupakan hasil dari struktur molekul yang dihitung, gerak atom yang dianalisis, perubahan momen dipol yang dievaluasi, dan data numerik yang divisualisasikan.

Bab ini juga menegaskan bahwa perhitungan frekuensi memiliki dua fungsi utama. Pertama, frekuensi digunakan untuk membuat dan menafsirkan spektrum IR. Kedua, frekuensi digunakan untuk memvalidasi struktur hasil optimasi. Jika terdapat frekuensi imajiner, struktur belum dapat langsung dianggap sebagai minimum lokal. Oleh karena itu, perhitungan frekuensi merupakan tahap penting setelah optimasi geometri.

Dalam interpretasi spektrum IR, Bab 9 menekankan bahwa puncak IR harus dibaca berdasarkan frekuensi, intensitas, dan mode normal. Frekuensi menunjukkan posisi puncak. Intensitas menunjukkan kuat-lemahnya serapan. Mode normal menunjukkan gerak atom yang menghasilkan puncak. Ketiganya harus digunakan bersama agar analisis tidak menjadi hafalan daerah IR semata.

Implikasi Keilmuan Bab 9

Bab 9 memiliki beberapa implikasi keilmuan penting.

Pertama, bab ini memperlihatkan bahwa molekul adalah sistem dinamis. Struktur teroptimasi bukan benda statis, tetapi konfigurasi kesetimbangan tempat atom-atom bergetar.

Kedua, bab ini memperlihatkan bahwa spektrum IR merupakan jembatan antara struktur molekul dan sifat eksperimen. Puncak IR memberi informasi tentang ikatan, gugus fungsi, dan mode vibrasi.

Ketiga, bab ini memperlihatkan bahwa kimia komputasi dapat membantu interpretasi spektroskopi. Dengan perhitungan frekuensi, mahasiswa dapat memvisualisasikan mode normal dan memahami puncak yang sulit ditafsirkan hanya dari tabel daerah IR.

Keempat, bab ini memperlihatkan pentingnya validasi struktur. Frekuensi imajiner memberi peringatan bahwa struktur belum minimum dan harus diperiksa ulang.

Kelima, bab ini memperlihatkan bahwa hasil komputasi selalu bergantung pada model. Frekuensi harmonik, metode, basis set, dan faktor skala harus disebutkan agar hasil dapat dievaluasi secara ilmiah.

Keenam, bab ini memperkuat hubungan antara teori dan praktik. Konsep osilator harmonik, Hessien, mode normal, intensitas IR, dan faktor skala diterapkan langsung dalam pengolahan data spektrum.

Implikasi Praktis Bab 9

Secara praktis, Bab 9 membekali mahasiswa dengan kemampuan berikut:

1. Membangun struktur molekul model untuk perhitungan frekuensi.
2. Menjalankan optimasi geometri sebelum perhitungan frekuensi.
3. Menjalankan perhitungan frekuensi melalui ChemCompute atau software kimia komputasi lain.
4. Membaca frekuensi vibrasi dari output.
5. Membaca intensitas IR dari output.
6. Memeriksa ada tidaknya frekuensi imajiner.
7. Menghitung jumlah mode vibrasi berdasarkan jumlah atom dan bentuk molekul.
8. Menghubungkan puncak IR dengan O–H, N–H, C–H, C=O, dan C–O.
9. Menerapkan faktor skala pada frekuensi komputasi.
10. Membuat spektrum IR simulasi menggunakan Python.
11. Membuat daftar puncak utama.
12. Membandingkan spektrum dua molekul.
13. Menyimpan hasil analisis dalam CSV.
14. Menulis analisis spektrum IR berbasis data.
15. Menjelaskan keterbatasan spektrum komputasi dibanding spektrum eksperimen.

Kemampuan tersebut penting karena spektroskopi IR banyak digunakan dalam kimia organik, kimia analitik, kimia fisik, biokimia, kimia material, dan kimia lingkungan. Dengan pendekatan komputasi, mahasiswa memperoleh cara tambahan untuk memahami dan memprediksi spektrum.

Keterbatasan Pembahasan Bab 9

Bab 9 membahas frekuensi vibrasi dan spektrum IR pada tingkat praktikum dasar. Karena itu, beberapa keterbatasan perlu disadari.

Pertama, perhitungan frekuensi yang dibahas terutama menggunakan pendekatan harmonik. Molekul nyata bersifat anharmonik, sehingga frekuensi komputasi dapat berbeda dari eksperimen.

Kedua, spektrum simulasi yang dibuat dengan Python menggunakan fungsi pelebaran sederhana. Spektrum ini berguna untuk pembelajaran, tetapi tidak sepenuhnya menggambarkan semua efek instrumen dan kondisi sampel.

Ketiga, pembahasan faktor skala masih bersifat praktis. Pemilihan faktor skala secara rinci sebenarnya bergantung pada metode, basis set, dan data pembandingan.

Keempat, molekul model yang digunakan relatif sederhana. Molekul yang lebih besar dapat memiliki mode normal yang lebih kompleks dan puncak yang tumpang tindih.

Kelima, pembahasan lingkungan molekul masih terbatas. Efek pelarut, fase cair, fase padat, ikatan hidrogen antarmolekul, dan interaksi kristal belum dimodelkan secara mendalam.

Keenam, visualisasi mode normal disebut sebagai bagian penting, tetapi analisis tabel karakter dan simetri vibrasi tidak dibahas secara formal penuh.

Ketujuh, Bab 9 belum membahas spektrum Raman secara mendalam. Raman hanya disinggung sebagai pembandingan bahwa IR berkaitan dengan perubahan momen dipol, sedangkan Raman berkaitan dengan perubahan polarisabilitas.

Dengan memahami keterbatasan ini, mahasiswa diharapkan tidak menafsirkan spektrum komputasi secara berlebihan. Spektrum komputasi adalah model ilmiah yang kuat, tetapi tetap harus dibaca dalam konteks metode, asumsi, dan kondisi perhitungan.

Arah Menuju Bab Berikutnya

Setelah Bab 9 membahas frekuensi vibrasi dan spektrum IR komputasi, bab berikutnya dapat diarahkan pada topik yang lebih lanjut, seperti spektrum Raman, termokimia komputasi, energi bebas, reaksi kimia, keadaan transisi, atau sifat molekul lain yang diturunkan dari hasil perhitungan

frekuensi. Bab 9 telah memberikan fondasi penting karena perhitungan frekuensi tidak hanya digunakan untuk IR, tetapi juga menjadi dasar bagi analisis termodinamika dan validasi keadaan transisi dalam kimia komputasi.

Pemahaman dari Bab 9 dapat dirangkum dalam alur berikut:

```
geometri teroptimasi
→ frekuensi vibrasi
→ validasi minimum
→ spektrum IR
→ identifikasi gugus fungsi
→ analisis struktur dan sifat molekul
```

Dengan bekal ini, mahasiswa siap mempelajari praktikum lanjutan yang memerlukan pemahaman tentang energi, vibrasi, entalpi, entropi, energi bebas, atau jalur reaksi.

Daftar Pustaka Bab 9

Atkins, P. W., & de Paula, J. (2014). *Atkins' Physical Chemistry* (10th ed.). Oxford University Press.

Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular Quantum Mechanics* (5th ed.). Oxford University Press.

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.

Foresman, J. B., & Frisch, A. E. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.

Harris, D. C., & Bertolucci, M. D. (1989). *Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*. Dover Publications.

Herzberg, G. (1945). *Molecular Spectra and Molecular Structure II: Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*. D. Van Nostrand.

Hollas, J. M. (2004). *Modern Spectroscopy* (4th ed.). John Wiley & Sons.

Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Prentice Hall.

Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.

Lewars, E. G. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (3rd ed.). Springer.

McQuarrie, D. A., & Simon, J. D. (1997). *Physical Chemistry: A Molecular Approach*. University Science Books.

Schmidt, M. W., Baldridge, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, J. H., Koseki, S., Matsunaga, N., Nguyen, K. A., Su, S., Windus, T. L., Dupuis, M., & Montgomery, J. A. (1993). General atomic and molecular electronic structure system. *Journal of Computational Chemistry*, 14(11), 1347–1363.

Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.

Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system—Version 5.0. *WIREs Computational Molecular Science*, 12(5), e1606.

Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4, 17.

Schaftenaar, G., & Noordik, J. H. (2000). Molden: A pre- and post-processing program for molecular and electronic structures. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 14, 123–134.

Harris, C. R., Millman, K. J., van der Walt, S. J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N. J., Kern, R., Picus, M., Hoyer, S., van Kerkwijk, M. H., Brett, M., Haldane, A., del Río, J. F., Wiebe, M., Peterson, P., Gérard-Marchant, P., Sheppard, K., Reddy, T., Weckesser, W., Abbasi, H., Gohlke, C., & Oliphant, T. E. (2020). Array programming with NumPy. *Nature*, 585, 357–362.

Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, 9(3), 90–95.

McKinney, W. (2010). Data structures for statistical computing in Python. In S. van der Walt & J. Millman (Eds.), *Proceedings of the 9th Python in Science Conference* (pp. 56–61).

Wilson, E. B., Decius, J. C., & Cross, P. C. (1955). *Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*. McGraw-Hill.

BAB 10

PRAKTIKUM 7: ENERGI REAKSI, TERMODINAMIKA, DAN EFEK PELARUT

10.1 Tujuan Praktikum

Praktikum 7 membahas **energi reaksi, termodinamika, dan efek pelarut**. Praktikum ini menempati posisi penting dalam rangkaian pembelajaran kimia komputasi karena mahasiswa mulai bergerak dari analisis struktur tunggal menuju analisis perubahan kimia. Jika pada praktikum sebelumnya mahasiswa menghitung geometri molekul, orbital, momen dipol, frekuensi vibrasi, dan spektrum IR, maka pada Praktikum 7 mahasiswa diarahkan untuk menjawab pertanyaan yang lebih luas: **apakah suatu reaksi atau perubahan struktur lebih stabil secara energi, bagaimana entalpi dan energi bebas Gibbs dihitung, dan bagaimana pelarut memengaruhi kestabilan molekul atau spesies bermuatan.**

Tujuan utama Praktikum 7 adalah agar mahasiswa mampu **menghitung energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, dan pengaruh pelarut terhadap kestabilan molekul**. Tujuan ini tidak hanya bersifat teknis, tetapi juga konseptual. Mahasiswa tidak cukup hanya mengambil angka energi dari output software. Mahasiswa harus memahami perbedaan antara energi elektronik, energi dengan koreksi zero-point energy, entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs. Mahasiswa juga harus mampu menjelaskan mengapa pelarut dapat mengubah kestabilan relatif reaktan, produk, isomer, konformer, dimer, atau spesies bermuatan.

Dalam kimia, banyak pertanyaan penting sebenarnya adalah pertanyaan energi. Mengapa isomer trans-2-butena lebih stabil daripada cis-2-butena? Mengapa amonia dapat diprotonasi? Mengapa formaldehida dapat mengalami hidrasi? Mengapa dua molekul air dapat membentuk dimer? Mengapa etanol memiliki lebih dari satu konformer? Mengapa asam asetat dapat membentuk dimer melalui ikatan hidrogen? Semua pertanyaan tersebut tidak cukup dijawab hanya dengan menggambar struktur. Pertanyaan tersebut memerlukan analisis energi, termodinamika, interaksi antarmolekul, dan pengaruh lingkungan.

Secara umum, Praktikum 7 menghubungkan beberapa konsep utama:

- struktur molekul
- energi elektronik
- koreksi vibrasi
- entalpi
- entropi
- energi bebas Gibbs
- kestabilan relatif
- pengaruh pelarut
- interpretasi reaksi

Dengan alur tersebut, mahasiswa belajar bahwa kimia komputasi tidak hanya menghasilkan struktur molekul yang indah secara visual, tetapi juga membantu menjelaskan arah kecenderungan reaksi dan kestabilan spesies kimia.

1. Makna Energi Reaksi dalam Kimia Komputasi

Tujuan pertama Praktikum 7 adalah agar mahasiswa mampu menghitung **energi reaksi**. Energi reaksi adalah selisih energi antara produk dan reaktan. Dalam bentuk paling sederhana, energi reaksi dapat ditulis:

$$\Delta E = E_{\text{produk}} - E_{\text{reaktan}}$$

Jika reaksi melibatkan lebih dari satu reaktan atau produk, energi total dihitung dengan menjumlahkan energi masing-masing spesies sesuai koefisien stoikiometri.

Secara konseptual:

ΔE negatif

→ produk lebih rendah energi daripada reaktan

→ proses secara energi elektronik lebih menguntungkan

ΔE positif

→ produk lebih tinggi energi daripada reaktan

→ proses secara energi elektronik kurang menguntungkan

Namun, mahasiswa harus segera memahami bahwa ΔE bukan satu-satunya ukuran spontanitas. Energi elektronik hanya menggambarkan sebagian dari keadaan sistem. Untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu, diperlukan entalpi dan energi bebas Gibbs. Karena itu, Praktikum 7 tidak berhenti pada ΔE , tetapi melanjutkan ke ΔH dan ΔG .

Dalam konteks praktikum, energi reaksi dihitung dari output software dengan metode yang sama untuk reaktan dan produk. Prinsip ini sangat penting. Mahasiswa tidak boleh menghitung energi reaktan menggunakan satu metode, lalu energi produk menggunakan metode lain, kemudian membandingkannya seolah-olah setara. Perbandingan energi hanya bermakna jika level teori, basis set, muatan, multiplicity, dan model pelarut digunakan secara konsisten.

2. Memahami Perbedaan Energi Elektronik, Entalpi, dan Energi Bebas Gibbs

Tujuan kedua adalah agar mahasiswa mampu membedakan **energi elektronik**, **entalpi**, dan **energi bebas Gibbs**. Ketiga besaran ini sering muncul dalam output kimia komputasi, tetapi memiliki makna berbeda.

Energi elektronik adalah energi yang diperoleh dari penyelesaian masalah struktur elektronik pada geometri tertentu. Energi ini terutama menggambarkan kontribusi elektron dan inti pada tingkat teori yang digunakan. Dalam output software, energi elektronik sering dinyatakan dalam satuan Hartree.

Entalpi adalah besaran termodinamika yang mencakup energi internal dan kontribusi tekanan-volume. Dalam perhitungan kimia komputasi molekul gas ideal, entalpi biasanya diperoleh dari energi elektronik ditambah koreksi termal, termasuk kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan koreksi lainnya.

Energi bebas Gibbs adalah besaran termodinamika yang menggabungkan entalpi dan entropi:

$$G = H - TS$$

Untuk perubahan reaksi:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Makna praktisnya sangat penting. Reaksi dengan ΔH negatif belum tentu memiliki ΔG negatif jika perubahan entropinya tidak mendukung. Sebaliknya, proses yang tidak terlalu menguntungkan secara entalpi dapat menjadi menguntungkan jika kontribusi entropinya besar.

Dalam Praktikum 7, mahasiswa harus memahami bahwa:

ΔE

→ selisih energi elektronik

ΔH

→ selisih entalpi, memasukkan koreksi termal

ΔG

→ selisih energi bebas Gibbs, memasukkan entalpi dan entropi

Dengan memahami perbedaan ini, mahasiswa dapat menghindari kesalahan umum, yaitu menyamakan energi elektronik dengan spontanitas reaksi.

3. Tujuan Memahami Zero-Point Energy

Praktikum 7 juga bertujuan memperkenalkan pentingnya **zero-point energy** atau ZPE. ZPE adalah energi vibrasi minimum yang tetap dimiliki molekul bahkan pada keadaan dasar vibrasi. Dalam mekanika kuantum, osilator harmonik tidak dapat memiliki energi vibrasi nol mutlak. Berbeda dari model klasik, sistem kuantum tetap memiliki energi titik nol.

Secara konseptual:

energi elektronik

→ energi pada struktur elektronik

zero-point energy

→ koreksi energi vibrasi dasar

energi terkoreksi ZPE

→ energi elektronik + ZPE

ZPE penting karena reaktan dan produk dapat memiliki jumlah dan jenis mode vibrasi berbeda. Jika perbandingan energi dilakukan hanya berdasarkan energi elektronik, sebagian kontribusi vibrasi dasar belum diperhitungkan. Dalam beberapa kasus, koreksi ZPE dapat memengaruhi kestabilan relatif, terutama jika energi dua spesies sangat berdekatan.

Dalam Praktikum 7, mahasiswa tidak harus menurunkan teori kuantum ZPE secara matematis lengkap, tetapi harus memahami bahwa ZPE berasal dari sifat kuantum vibrasi molekul. Konsep ini melanjutkan Bab 9 tentang frekuensi vibrasi. Frekuensi yang dihitung pada Bab 9 tidak hanya berguna untuk spektrum IR, tetapi juga menjadi dasar koreksi termokimia seperti ZPE, entalpi, dan entropi.

4. Tujuan Memahami Entropi dan Spontanitas

Tujuan berikutnya adalah agar mahasiswa memahami peran **entropi** dalam menentukan energi bebas Gibbs. Entropi sering dipahami secara sederhana sebagai ukuran ketidakteraturan, tetapi dalam termodinamika molekuler entropi lebih tepat dipahami sebagai ukuran jumlah keadaan mikro yang dapat diakses oleh sistem.

Dalam reaksi kimia, perubahan entropi dapat memengaruhi spontanitas. Jika reaksi menghasilkan lebih banyak partikel bebas dari sebelumnya, entropi cenderung meningkat. Jika beberapa molekul bergabung menjadi satu kompleks, entropi translasi dapat menurun. Oleh karena itu, reaksi dimerisasi atau asosiasi sering memiliki penalti entropi, meskipun secara entalpi dapat menguntungkan karena terbentuk interaksi seperti ikatan hidrogen.

Contoh penting adalah dimer air dan dimer asam asetat. Pembentukan dimer dapat menguntungkan secara entalpi karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, dua molekul yang semula bebas menjadi satu kompleks, sehingga entropi translasi berkurang. Akibatnya, ΔG dapat berbeda signifikan dari ΔH .

Secara konseptual:

pembentukan ikatan hidrogen

→ ΔH dapat menguntungkan

penggabungan dua molekul menjadi satu dimer

→ entropi translasi menurun

ΔG

→ hasil gabungan ΔH dan $-T\Delta S$

Dengan memahami hal ini, mahasiswa dapat menjelaskan mengapa ΔE , ΔH , dan ΔG tidak selalu memberikan kesimpulan yang sama kuat.

5. Tujuan Memahami Pengaruh Pelarut

Tujuan penting lain Praktikum 7 adalah agar mahasiswa mampu menjelaskan **pengaruh pelarut terhadap kestabilan molekul**. Dalam banyak reaksi kimia nyata, molekul tidak berada dalam ruang kosong, melainkan berada dalam pelarut. Pelarut dapat memengaruhi energi relatif reaktan dan produk, terutama jika spesies yang terlibat bersifat polar atau bermuatan.

Pelarut polar dapat menstabilkan spesies bermuatan atau sangat polar melalui interaksi elektrostatik. Dalam model pelarut kontinu, pelarut tidak dimodelkan sebagai molekul-molekul eksplisit satu per satu, tetapi sebagai medium kontinu dengan sifat dielektrik tertentu. Model ini menyederhanakan pengaruh pelarut agar dapat dihitung secara praktis.

Secara konseptual:

```
spesies bermuatan atau polar
→ berinteraksi kuat dengan pelarut polar
→ energi relatif dapat turun
→ kestabilan meningkat
```

Contoh yang relevan adalah protonasi amonia. Amonia netral dapat menerima proton menjadi ion amonium. Spesies bermuatan seperti ion amonium biasanya jauh lebih dipengaruhi oleh pelarut polar dibanding spesies netral. Karena itu, perbandingan fase gas dan pelarut dapat menunjukkan perubahan energi yang signifikan.

Mahasiswa harus memahami bahwa pelarut tidak hanya “lingkungan pasif”. Pelarut dapat mengubah kestabilan relatif, menggeser kesetimbangan, dan memengaruhi kecenderungan reaksi.

6. Sistem Reaksi Model sebagai Sarana Pencapaian Tujuan

Praktikum 7 menggunakan enam sistem reaksi model:

1. Isomerisasi cis-trans 2-butena.
2. Protonasi amonia.
3. Hidrasi formaldehida.
4. Dimer air.
5. Konformer etanol.
6. Asam asetat monomer dan dimer.

Sistem-sistem ini dipilih karena mewakili berbagai jenis persoalan energi dan termodinamika.

Isomerisasi cis-trans 2-butena digunakan untuk membandingkan kestabilan dua isomer. Trans-2-butena umumnya lebih stabil daripada cis-2-butena karena efek sterik lebih kecil. Sistem ini membantu mahasiswa memahami energi relatif isomer.

Protonasi amonia digunakan untuk melihat perubahan energi pada reaksi yang melibatkan spesies bermuatan. Sistem ini sangat relevan untuk membahas efek pelarut karena ion amonium dapat distabilkan oleh pelarut polar.

Hidrasi formaldehida digunakan untuk membahas reaksi adisi air pada gugus karbonil. Sistem ini menghubungkan kimia organik, termodinamika, dan efek pelarut.

Dimer air digunakan untuk mempelajari ikatan hidrogen dan pembentukan kompleks antarmolekul. Sistem ini penting untuk membedakan kontribusi entalpi dan entropi.

Konformer etanol digunakan untuk membandingkan kestabilan struktur yang berbeda tetapi memiliki rumus molekul sama. Sistem ini membantu mahasiswa memahami energi relatif konformer.

Asam asetat monomer dan dimer digunakan untuk mempelajari pembentukan dimer melalui ikatan hidrogen. Sistem ini sangat baik untuk membahas hubungan antara energi interaksi, entalpi, entropi, dan efek fase.

Dengan sistem model tersebut, mahasiswa tidak hanya menghitung angka energi, tetapi melihat bagaimana konsep termodinamika muncul dalam berbagai situasi kimia.

7. Tujuan Operasional Praktikum

Secara operasional, setelah menyelesaikan Praktikum 7, mahasiswa diharapkan mampu:

1. Menyiapkan struktur reaktan dan produk untuk sistem reaksi model.
2. Mengoptimasi geometri setiap spesies dengan metode yang sama.
3. Menghitung energi elektronik setiap spesies.
4. Mengambil koreksi ZPE dari output frekuensi jika tersedia.
5. Mengambil entalpi dan energi bebas Gibbs dari output.
6. Menghitung ΔE untuk setiap reaksi atau perubahan struktur.
7. Menghitung ΔH berdasarkan data entalpi.
8. Menghitung ΔG berdasarkan data energi bebas Gibbs.
9. Mengonversi energi dari Hartree ke kJ/mol.
10. Membandingkan hasil fase gas dan pelarut.
11. Menyusun diagram energi reaksi.
12. Membuat tabel energi reaktan dan produk.
13. Membuat tabel ΔE , ΔH , dan ΔG .
14. Menjelaskan mengapa ΔE , ΔH , dan ΔG dapat berbeda.
15. Menjelaskan bagaimana pelarut menstabilkan spesies polar atau bermuatan.

16. Menulis analisis termodinamika berbasis data.

Tujuan operasional ini menunjukkan bahwa Praktikum 7 menggabungkan keterampilan komputasi, perhitungan numerik, interpretasi termodinamika, dan penulisan ilmiah.

8. Tujuan Menggunakan Metode yang Konsisten

Salah satu tujuan metodologis Praktikum 7 adalah melatih mahasiswa menggunakan metode yang konsisten. Dalam perhitungan energi reaksi, konsistensi sangat penting. Semua reaktan dan produk harus dihitung dengan level teori yang sama. Jika cis-2-butena dihitung dengan satu metode dan trans-2-butena dengan metode lain, maka selisih energi tidak dapat ditafsirkan secara benar.

Prinsip konsistensi meliputi:

1. Metode harus sama.
2. Basis set harus sama.
3. Muatan dan multiplicity harus benar.
4. Model pelarut harus sama untuk perbandingan dalam satu kondisi.
5. Kriteria optimasi sebaiknya sebanding.
6. Koreksi termal harus diambil dari jenis perhitungan yang sama.
7. Satuan energi harus diseragamkan.

Secara konseptual:

perbandingan energi yang valid
→ memerlukan level teori yang konsisten

Kesalahan metodologis yang harus dihindari:

reaktan dihitung dengan HF/STO-3G
produk dihitung dengan B3LYP/6-31G(d)
→ ΔE tidak valid untuk dibandingkan langsung

Dengan menekankan konsistensi, Praktikum 7 melatih mahasiswa berpikir seperti peneliti komputasi, bukan sekadar pengguna software.

9. Tujuan Menguasai Konversi Satuan Energi

Output software kimia kuantum sering menyajikan energi dalam satuan Hartree. Namun, dalam kimia termodinamika, energi reaksi sering dibahas dalam kJ/mol atau kcal/mol. Oleh karena itu, mahasiswa harus mampu mengonversi satuan.

Konversi yang umum digunakan:

1 Hartree $\approx$ 2625,5 kJ/mol

Jika selisih energi dalam Hartree adalah:

$$\Delta E = -0,010 \text{ Hartree}$$

maka dalam kJ/mol:

$$\begin{aligned} \Delta E &= -0,010 \times 2625,5 \\ &= -26,255 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Konversi ini penting karena selisih energi antarspesies sering kecil dalam Hartree tetapi signifikan dalam kJ/mol. Mahasiswa harus berhati-hati membaca angka. Selisih energi 0,001 Hartree tampak kecil, tetapi setara sekitar 2,6 kJ/mol.

Tujuan ini sangat penting untuk jalur Python mandiri pada subbab 10.6, karena kode wajib memuat konversi Hartree ke kJ/mol.

10. Tujuan Membandingkan Fase Gas dan Pelarut

Praktikum 7 juga bertujuan agar mahasiswa mampu membandingkan hasil **fase gas** dan **pelarut**. Dalam fase gas, molekul dihitung tanpa lingkungan pelarut. Dalam model pelarut kontinu, molekul ditempatkan dalam medium dengan konstanta dielektrik tertentu. Perbandingan ini membantu mahasiswa memahami bagaimana lingkungan memengaruhi energi relatif.

Perbandingan fase gas dan pelarut dapat ditulis:

```
ΔG_fase_gas
→ perubahan energi bebas tanpa pelarut

ΔG_pelarut
→ perubahan energi bebas dengan model pelarut

perbedaan keduanya
→ menunjukkan pengaruh pelarut
```

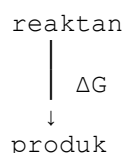
Sistem yang sangat cocok untuk membahas hal ini adalah protonasi amonia. Spesies bermuatan seperti NH_4^+ dapat distabilkan oleh pelarut polar. Akibatnya, energi relatif dalam pelarut dapat berbeda dari fase gas.

Perbandingan fase gas dan pelarut juga relevan untuk hidrasi formaldehida dan dimer asam asetat. Reaksi yang melibatkan pembentukan atau pemutusan interaksi polar dapat sangat dipengaruhi oleh pelarut.

11. Tujuan Membaca Diagram Energi Reaksi

Mahasiswa juga diharapkan mampu membuat dan membaca **diagram energi reaksi**. Diagram energi reaksi adalah representasi visual yang menunjukkan energi relatif reaktan dan produk. Diagram ini membantu mahasiswa melihat apakah produk lebih stabil atau kurang stabil dibanding reaktan.

Diagram sederhana:



Jika produk lebih rendah energi daripada reaktan, reaksi secara termodinamika lebih menguntungkan. Jika produk lebih tinggi, reaksi kurang menguntungkan. Untuk beberapa sistem, diagram dapat membandingkan lebih dari dua keadaan, misalnya beberapa konformer etanol atau monomer dan dimer asam asetat.

Diagram energi sangat berguna karena angka energi dalam tabel kadang sulit dibaca. Dengan diagram, mahasiswa dapat melihat pola kestabilan secara visual. Namun, diagram harus dibuat dari data yang benar dan satuan yang jelas.

12. Tujuan Menghubungkan Praktikum 7 dengan Bab Sebelumnya

Praktikum 7 tidak berdiri sendiri. Bab ini melanjutkan beberapa konsep dari bab sebelumnya.

Dari praktikum geometri, mahasiswa menggunakan struktur hasil optimasi sebagai dasar perhitungan energi.

Dari praktikum orbital, mahasiswa memahami bahwa energi elektronik berasal dari model struktur elektronik.

Dari praktikum simetri dan momen dipol, mahasiswa memahami mengapa spesies polar atau bermuatan berinteraksi kuat dengan pelarut.

Dari praktikum frekuensi dan IR, mahasiswa memahami bahwa frekuensi vibrasi menghasilkan koreksi ZPE, entalpi, dan entropi.

Dengan demikian, Praktikum 7 menjadi titik integrasi:

```

geometri
+ energi elektronik
+ frekuensi vibrasi
+ termodinamika
  
```

+ pelarut
→ analisis energi reaksi

Integrasi ini penting karena dalam kimia komputasi, hasil yang kuat biasanya tidak hanya berasal dari satu jenis perhitungan. Struktur, energi, frekuensi, dan lingkungan harus dipahami bersama.

13. Analisis Kritis yang Diharapkan

Praktikum 7 menuntut mahasiswa untuk berpikir kritis. Mahasiswa harus memahami bahwa hasil ΔE , ΔH , dan ΔG bergantung pada metode, basis set, koreksi termal, dan model pelarut. Angka komputasi tidak boleh diterima tanpa pertanyaan.

Analisis kritis yang diharapkan meliputi:

1. Apakah semua spesies telah dioptimasi?
2. Apakah perhitungan frekuensi menunjukkan tidak ada frekuensi imajiner untuk minimum?
3. Apakah metode sama untuk reaktan dan produk?
4. Apakah basis set sama?
5. Apakah muatan dan multiplicity benar?
6. Apakah energi dikonversi dengan benar?
7. Apakah ΔE , ΔH , dan ΔG dibedakan?
8. Apakah efek entropi dijelaskan?
9. Apakah efek pelarut masuk akal secara kimia?
10. Apakah model pelarut kontinu memiliki keterbatasan?

Contoh sikap kritis:

Jika ΔE menunjukkan produk lebih stabil tetapi ΔG tidak, maka perlu diperiksa kontribusi entropi. Jika reaksi melibatkan penggabungan dua molekul menjadi satu kompleks, penurunan entropi dapat membuat ΔG kurang menguntungkan meskipun ΔE atau ΔH tampak menguntungkan.

Sikap ini menunjukkan bahwa mahasiswa tidak hanya menghitung, tetapi menafsirkan.

14. Implikasi Keilmuan Praktikum 7

Praktikum 7 memiliki implikasi keilmuan penting.

Pertama, praktikum ini memperlihatkan bahwa kestabilan molekul dapat dihitung secara kuantitatif. Isomer, konformer, reaktan, produk, monomer, dan dimer dapat dibandingkan berdasarkan energi relatif.

Kedua, praktikum ini memperlihatkan bahwa energi elektronik tidak identik dengan spontanitas. Untuk menilai kecenderungan termodinamika, perlu diperhatikan entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs.

Ketiga, praktikum ini menunjukkan bahwa pelarut dapat mengubah hasil termodinamika. Spesies polar dan bermuatan dapat menjadi lebih stabil dalam pelarut polar.

Keempat, praktikum ini memperlihatkan pentingnya koreksi termal. Frekuensi vibrasi tidak hanya menghasilkan spektrum IR, tetapi juga memberi kontribusi pada ZPE, entalpi, dan entropi.

Kelima, praktikum ini menunjukkan bahwa kimia komputasi dapat menjembatani kimia fisik, kimia organik, kimia larutan, dan termodinamika.

15. Implikasi Praktis bagi Mahasiswa

Secara praktis, setelah mempelajari subbab ini, mahasiswa harus mulai menyadari bahwa perhitungan energi reaksi membutuhkan ketelitian lebih tinggi daripada sekadar optimasi satu molekul. Setiap reaksi melibatkan beberapa spesies. Jika salah satu spesies salah dihitung, hasil energi reaksi akan salah.

Mahasiswa juga harus memahami bahwa kesalahan kecil dalam energi dapat berdampak besar dalam interpretasi. Misalnya, selisih beberapa kJ/mol dapat menentukan konformer mana yang lebih stabil. Pada sistem ikatan hidrogen, perubahan kecil dalam orientasi geometri dapat mengubah energi interaksi. Pada spesies bermuatan, pilihan model pelarut dapat memengaruhi kestabilan secara signifikan.

Karena itu, Praktikum 7 melatih disiplin kerja:

```
struktur benar
→ metode konsisten
→ energi dihitung
→ koreksi termal diambil
→ satuan dikonversi
→  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$  dihitung
→ fase gas dan pelarut dibandingkan
→ hasil dianalisis kritis
```

Disiplin ini sangat penting bagi mahasiswa yang ingin menggunakan kimia komputasi dalam riset.

16. Indikator Keberhasilan Praktikum

Mahasiswa dinyatakan berhasil mencapai tujuan Praktikum 7 jika mampu menunjukkan indikator berikut:

1. Menjelaskan pengertian energi reaksi.
2. Menghitung ΔE dari energi produk dan reaktan.
3. Menjelaskan perbedaan energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs.
4. Menghitung ΔH dari data entalpi output.
5. Menghitung ΔG dari data energi bebas Gibbs output.
6. Menjelaskan peran ZPE dalam koreksi energi.
7. Menjelaskan peran entropi dalam energi bebas Gibbs.
8. Mengonversi energi dari Hartree ke kJ/mol.
9. Menjelaskan pengaruh pelarut terhadap spesies polar dan bermuatan.
10. Membandingkan hasil fase gas dan pelarut.
11. Membuat diagram energi reaksi.
12. Membuat tabel energi reaktan dan produk.
13. Membuat tabel ΔE , ΔH , dan ΔG .
14. Menafsirkan kestabilan relatif isomer, konformer, monomer, dimer, reaktan, dan produk.
15. Menulis analisis termodinamika secara ilmiah dan kritis.

Indikator ini menjadi pedoman untuk pelaksanaan praktikum, penyusunan laporan, dan penilaian hasil belajar.

17. Transisi ke Dasar Teori

Subbab 10.1 telah menjelaskan tujuan Praktikum 7, yaitu agar mahasiswa mampu menghitung energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, dan pengaruh pelarut terhadap kestabilan molekul. Tujuan tersebut mencakup pemahaman energi elektronik, ZPE, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs, konversi satuan, diagram energi, serta perbandingan fase gas dan pelarut.

Subbab berikutnya akan membahas dasar teori. Pada subbab 10.2, pembahasan akan diarahkan pada energi elektronik, zero-point energy, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs, dan model pelarut kontinu. Dengan memahami tujuan praktikum terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap mempelajari landasan teoretis yang diperlukan untuk menghitung dan menafsirkan energi reaksi secara benar.

10.2 Dasar Teori

Dasar teori Praktikum 7 membahas **energi elektronik, zero-point energy, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs, dan model pelarut kontinu**. Keenam konsep ini menjadi fondasi untuk memahami bagaimana kimia komputasi digunakan dalam analisis energi reaksi, kestabilan relatif, termodinamika molekul, serta pengaruh pelarut terhadap reaktan dan produk. Tanpa dasar teori ini, mahasiswa hanya akan mengambil angka energi dari output software tanpa memahami makna fisiknya, batas validitasnya, dan cara menafsirkannya secara ilmiah.

Dalam kimia komputasi, energi merupakan salah satu besaran paling penting. Struktur molekul yang telah dioptimasi tidak hanya memberikan posisi atom, tetapi juga nilai energi yang dapat dibandingkan dengan struktur lain. Dari perbandingan energi inilah mahasiswa dapat menilai

apakah suatu isomer lebih stabil, apakah pembentukan dimer menguntungkan, apakah protonasi menjadi lebih stabil dalam pelarut, atau apakah suatu reaksi cenderung menghasilkan produk tertentu.

Namun, istilah “energi” dalam kimia komputasi tidak tunggal. Output software dapat memuat energi elektronik, energi dengan koreksi zero-point energy, entalpi termal, entropi, energi bebas Gibbs, energi solvasi, atau energi total dalam model pelarut. Setiap besaran memiliki makna berbeda. Kesalahan dalam membedakan besaran-besaran tersebut dapat menghasilkan interpretasi yang keliru. Misalnya, menyamakan ΔE dengan ΔG dapat membuat mahasiswa salah menilai spontanitas reaksi. Menafsirkan energi fase gas sebagai energi larutan juga dapat menyesatkan, terutama untuk spesies polar atau bermuatan.

Secara historis, teori energi reaksi dan termodinamika kimia berkembang dari termodinamika klasik, mekanika statistik, dan mekanika kuantum. Termodinamika klasik memperkenalkan konsep entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs. Mekanika statistik menjelaskan asal-usul molekuler dari entropi dan kontribusi translasi, rotasi, serta vibrasi. Mekanika kuantum memungkinkan energi elektronik molekul dihitung dari struktur elektronik. Dalam kimia komputasi modern, ketiga kerangka tersebut digabungkan: energi elektronik dihitung dengan metode kuantum, koreksi termal diperoleh dari analisis vibrasi, dan efek pelarut dapat dimodelkan dengan pendekatan kontinu atau eksplisit.

Karya-karya dalam kimia fisik dan kimia komputasi seperti Atkins, McQuarrie dan Simon, Levine, Jensen, Cramer, Leach, Lewars, serta literatur model pelarut dari Tomasi, Mennucci, Cammi, Klamt, Cramer, dan Truhlar menunjukkan bahwa perhitungan energi reaksi harus selalu dipahami sebagai hasil model. Angka energi bukan fakta mutlak yang berdiri sendiri, tetapi hasil dari metode, basis set, geometri, koreksi termal, model pelarut, dan asumsi keadaan standar.

1. Energi Elektronik

Energi elektronik adalah energi yang diperoleh dari perhitungan struktur elektronik pada geometri tertentu. Dalam metode kimia kuantum, energi elektronik dihitung dengan menyelesaikan persamaan elektronik molekul melalui pendekatan tertentu, misalnya Hartree-Fock, DFT, semiempiris, atau metode korelasi elektron lain. Energi ini mencakup kontribusi elektron dan inti pada konfigurasi atom tertentu, tetapi belum secara lengkap mencakup koreksi termal seperti energi translasi, rotasi, vibrasi, entalpi, dan entropi.

Dalam output software, energi elektronik sering ditulis sebagai:

```
Electronic Energy
Total Energy
SCF Energy
DFT Energy
E_elec
```

Energi elektronik biasanya dinyatakan dalam satuan Hartree. Nilai absolut energi elektronik sering sangat besar dan negatif. Namun, dalam kimia reaksi, yang lebih penting bukan nilai absolutnya, melainkan selisih energi antara produk dan reaktan.

Rumus dasar energi reaksi elektronik:

$$\Delta E = E_{\text{produk}} - E_{\text{reaktan}}$$

Jika reaksi memiliki beberapa reaktan dan produk:

$$\Delta E = \sum E_{\text{produk}} - \sum E_{\text{reaktan}}$$

Contoh sederhana:



$$\Delta E = E(B) - E(A)$$

Jika ΔE bernilai negatif, maka B lebih rendah energi elektroniknya daripada A pada tingkat teori yang digunakan. Jika ΔE bernilai positif, maka B lebih tinggi energi elektroniknya daripada A.

Namun, energi elektronik saja belum cukup untuk menyimpulkan spontanitas reaksi. Energi elektronik tidak secara eksplisit memasukkan kontribusi entropi dan koreksi termal penuh. Karena itu, dalam Praktikum 7 mahasiswa harus membedakan ΔE , ΔH , dan ΔG .

2. Makna Kestabilan Relatif Berdasarkan Energi Elektronik

Energi elektronik sangat berguna untuk membandingkan kestabilan relatif spesies yang memiliki komposisi atom sama atau reaksi yang dihitung secara konsisten. Contoh penting adalah isomerisasi cis-trans 2-butena dan konformer etanol.

Pada **cis-trans 2-butena**, kedua isomer memiliki rumus molekul sama, tetapi susunan ruang berbeda. Jika trans-2-butena memiliki energi elektronik lebih rendah daripada cis-2-butena, maka trans-2-butena lebih stabil secara elektronik pada tingkat perhitungan tersebut. Secara kimia, hal ini dapat dijelaskan oleh efek sterik: gugus metil pada cis-2-butena lebih berdekatan sehingga tolakannya lebih besar, sedangkan pada trans-2-butena gugus metil berada berseberangan sehingga lebih stabil.

Pada **konformer etanol**, beberapa orientasi gugus O–H dan rangka C–C–O dapat menghasilkan energi berbeda. Konformer dengan energi lebih rendah dianggap lebih stabil. Perbedaan energi konformer sering kecil, sehingga ketelitian metode dan konversi satuan menjadi penting.

Contoh konseptual:

$$E_{\text{konformer}_1} = -154,123456 \text{ Hartree}$$

$$E_{\text{konformer}_2} = -154,122900 \text{ Hartree}$$

$$\Delta E = E_{\text{konformer}_2} - E_{\text{konformer}_1}$$

Selisih 0,000556 Hartree tampak kecil, tetapi jika dikonversi:

$$0,000556 \times 2625,5 \approx 1,46 \text{ kJ/mol}$$

Dalam kimia konformasi, selisih energi sebesar beberapa kJ/mol dapat bermakna. Oleh karena itu, mahasiswa harus terbiasa mengonversi Hartree ke kJ/mol agar dapat menafsirkan nilai energi secara kimiawi.

3. Konversi Satuan Hartree ke kJ/mol

Dalam kimia kuantum, satuan energi yang sering digunakan adalah **Hartree**. Dalam kimia termodinamika, satuan yang lebih lazim adalah kJ/mol. Karena itu, Praktikum 7 mengharuskan mahasiswa menguasai konversi satuan.

Konversi dasar:

$$1 \text{ Hartree} \approx 2625,5 \text{ kJ/mol}$$

Jika selisih energi dalam Hartree adalah $\Delta E_{\text{Hartree}}$, maka:

$$\Delta E_{\text{kJ/mol}} = \Delta E_{\text{Hartree}} \times 2625,5$$

Contoh:

$$\Delta E = -0,015 \text{ Hartree}$$

$$\Delta E = -0,015 \times 2625,5$$

$$\Delta E = -39,38 \text{ kJ/mol}$$

Mahasiswa harus memahami bahwa energi absolut dalam Hartree sering sangat besar, tetapi selisih energi reaksi bisa kecil. Oleh karena itu, pembulatan harus dilakukan dengan hati-hati. Perbedaan pada digit desimal energi elektronik dapat memengaruhi hasil dalam kJ/mol.

Kesalahan umum adalah membandingkan nilai energi absolut tanpa menghitung selisih, atau mengira bahwa perbedaan 0,001 Hartree tidak penting. Padahal:

$$0,001 \text{ Hartree} \approx 2,63 \text{ kJ/mol}$$

Nilai ini dapat relevan untuk perbandingan konformer, ikatan hidrogen, atau isomer yang energinya berdekatan.

4. Zero-Point Energy

Zero-point energy atau **ZPE** adalah energi vibrasi minimum yang tetap dimiliki molekul pada keadaan dasar vibrasi. Dalam mekanika klasik, osilator dapat dibayangkan berhenti sepenuhnya pada energi nol. Namun, dalam mekanika kuantum, osilator harmonik tidak dapat memiliki energi vibrasi nol mutlak. Bahkan pada tingkat vibrasi terendah, sistem tetap memiliki energi:

$$E_0 = 1/2 h\nu$$

Untuk molekul dengan banyak mode vibrasi, ZPE merupakan jumlah kontribusi dari semua mode vibrasi:

$$ZPE = 1/2 \sum h\nu_i$$

dengan ν_i adalah frekuensi vibrasi mode ke-i.

Dalam kimia komputasi, ZPE biasanya diperoleh dari perhitungan frekuensi. Inilah hubungan penting antara Bab 9 dan Bab 10. Frekuensi vibrasi tidak hanya digunakan untuk spektrum IR, tetapi juga menjadi dasar koreksi energi termokimia.

Energi elektronik yang dikoreksi ZPE dapat ditulis:

$$E_{ZPE} = E_{\text{elektronik}} + ZPE$$

Untuk perubahan reaksi:

$$\Delta E_{ZPE} = \sum (E_{\text{elektronik}} + ZPE)_{\text{produk}} - \sum (E_{\text{elektronik}} + ZPE)_{\text{reaktan}}$$

ZPE penting karena reaktan dan produk dapat memiliki pola vibrasi berbeda. Jika suatu reaksi mengubah jenis ikatan, jumlah mode, atau kekuatan ikatan, maka koreksi ZPE dapat memengaruhi selisih energi. Pada reaksi yang selisih energinya kecil, ZPE dapat mengubah kesimpulan kestabilan relatif.

5. ZPE dalam Konteks Praktikum 7

Dalam Praktikum 7, ZPE relevan untuk semua sistem reaksi model, tetapi sangat jelas pada sistem yang melibatkan perubahan ikatan atau ikatan hidrogen.

Pada **dimer air**, pembentukan kompleks dari dua molekul air menghasilkan mode vibrasi baru, termasuk mode antarmolekul yang lebih rendah frekuensinya. ZPE dimer tidak selalu sama dengan jumlah ZPE dua monomer air. Karena itu, energi interaksi yang hanya dihitung dari energi elektronik belum sepenuhnya memasukkan koreksi vibrasi dasar.

Pada **asam asetat monomer dan dimer**, pembentukan dimer melalui ikatan hidrogen menghasilkan perubahan mode vibrasi O–H dan mode antarmolekul. Koreksi ZPE dapat memengaruhi energi dimerisasi.

Pada **hidrasi formaldehida**, reaksi mengubah ikatan C=O menjadi struktur terhidrasi dengan ikatan C–O dan O–H. Karena jenis ikatan berubah, koreksi ZPE dapat bermakna.

Secara praktis, mahasiswa harus memahami alur berikut:

```
optimasi geometri
→ perhitungan frekuensi
→ ZPE
→ energi terkoreksi ZPE
→ perbandingan reaktan-produk
```

Jika tidak dilakukan perhitungan frekuensi, ZPE tidak dapat diperoleh secara langsung dari output termokimia. Oleh karena itu, perhitungan frekuensi menjadi bagian penting dalam analisis termodinamika.

6. Entalpi

Entalpi adalah besaran termodinamika yang dinyatakan sebagai:

$$H = U + PV$$

dengan:

```
H = entalpi
U = energi internal
P = tekanan
V = volume
```

Dalam kimia komputasi molekul gas ideal, entalpi biasanya dihitung dari energi elektronik ditambah koreksi termal. Koreksi termal mencakup kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan koreksi PV. Software kimia kuantum sering memberikan nilai entalpi total atau koreksi termal menuju entalpi.

Secara sederhana:

$$H \approx E_{\text{elektronik}} + \text{koreksi termal entalpi}$$

Untuk reaksi:

$$\Delta H = \Sigma H_{\text{produk}} - \Sigma H_{\text{reaktan}}$$

Jika ΔH negatif, reaksi bersifat eksotermis secara entalpi. Jika ΔH positif, reaksi bersifat endotermis secara entalpi. Namun, ΔH belum menentukan spontanitas secara lengkap karena belum memasukkan kontribusi entropi dalam bentuk $-T\Delta S$.

Dalam Praktikum 7, mahasiswa harus mengambil nilai entalpi dari output yang sama jenis perhitungannya untuk semua reaktan dan produk. Jika entalpi produk dan reaktan dihitung dengan metode yang berbeda, maka ΔH menjadi tidak valid.

7. Entalpi dan Energi Reaksi

Perbedaan antara ΔE dan ΔH perlu dipahami. ΔE biasanya merujuk pada selisih energi elektronik, sedangkan ΔH mencakup koreksi termal. Pada beberapa reaksi, ΔE dan ΔH dapat memiliki nilai yang cukup dekat, tetapi keduanya tidak identik.

Perbandingan:

Besaran	Makna	Kontribusi
ΔE	Selisih energi elektronik	Energi struktur elektronik
ΔE_{ZPE}	Energi elektronik + ZPE	Koreksi vibrasi dasar
ΔH	Selisih entalpi	Koreksi termal dan PV
ΔG	Selisih energi bebas Gibbs	Entalpi dan entropi

Contoh konseptual:

reaktan $\rightarrow$ produk

$$\Delta E = -20 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H = -18 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G = +5 \text{ kJ/mol}$$

Dalam contoh tersebut, energi elektronik dan entalpi tampak menguntungkan, tetapi energi bebas Gibbs tidak menguntungkan karena kontribusi entropi tidak mendukung. Kasus seperti ini dapat muncul pada proses asosiasi, misalnya pembentukan dimer dari dua monomer.

8. Entropi

Entropi adalah besaran termodinamika yang berkaitan dengan jumlah keadaan mikro yang dapat diakses oleh sistem. Dalam interpretasi sederhana, entropi sering disebut sebagai ukuran ketidakteraturan. Namun, untuk pembahasan molekuler, definisi yang lebih tepat adalah ukuran banyaknya kemungkinan susunan mikroskopik yang sesuai dengan keadaan makroskopik.

Dalam mekanika statistik, entropi berhubungan dengan jumlah keadaan mikro melalui persamaan Boltzmann:

$$S = k \ln W$$

dengan:

S = entropi

k = konstanta Boltzmann

W = jumlah keadaan mikro

Dalam kimia komputasi molekul gas ideal, entropi dihitung dari kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan elektronik. Untuk banyak molekul organik biasa pada keadaan dasar singlet, kontribusi elektronik terhadap entropi sering kecil, tetapi kontribusi translasi, rotasi, dan vibrasi dapat penting.

Entropi sangat penting dalam reaksi yang mengubah jumlah partikel. Jika dua molekul bergabung menjadi satu kompleks, entropi translasi biasanya menurun karena jumlah spesies bebas berkurang. Sebaliknya, reaksi yang menghasilkan lebih banyak molekul dapat meningkatkan entropi translasi.

Contoh:



dua molekul bebas

→ satu kompleks

→ entropi translasi menurun

Penurunan entropi ini dapat membuat ΔG kurang menguntungkan meskipun ΔH menguntungkan.

9. Energi Bebas Gibbs

Energi bebas Gibbs adalah besaran termodinamika yang digunakan untuk menilai kecenderungan spontanitas pada suhu dan tekanan tetap. Rumus dasarnya:

$$G = H - TS$$

Untuk reaksi:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

dengan:

G = energi bebas Gibbs

H = entalpi

T = suhu

S = entropi

Jika ΔG negatif, reaksi secara termodinamika menguntungkan pada kondisi tersebut. Jika ΔG positif, reaksi tidak menguntungkan secara termodinamika. Jika ΔG mendekati nol, reaksi berada dekat kesetimbangan.

Interpretasi umum:

$$\Delta G < 0$$

→ proses termodinamika menguntungkan

$$\Delta G > 0$$

→ proses termodinamika tidak menguntungkan

$$\Delta G \approx 0$$

→ sistem dekat kesetimbangan

Namun, ΔG tidak menjelaskan laju reaksi. Reaksi dengan ΔG negatif dapat berjalan sangat lambat jika memiliki penghalang energi aktivasi besar. Dengan demikian, spontanitas termodinamika berbeda dari kinetika reaksi. Praktikum 7 fokus pada termodinamika, bukan mekanisme kinetika penuh.

10. Mengapa ΔE Tidak Selalu Sama dengan ΔG

Salah satu konsep terpenting dalam Praktikum 7 adalah bahwa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG .

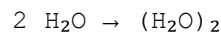
ΔE terutama menggambarkan selisih energi elektronik. ΔG mencakup kontribusi entalpi dan entropi. Karena itu, dua reaksi dapat memiliki ΔE yang mirip tetapi ΔG berbeda jika perubahan entropinya berbeda.

Hubungan:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Jika ΔS negatif, maka $-T\Delta S$ bernilai positif, sehingga ΔG menjadi lebih besar. Ini sering terjadi pada proses asosiasi atau dimerisasi.

Contoh:



pembentukan ikatan hidrogen

→ ΔH dapat negatif

dua molekul menjadi satu kompleks

→ ΔS negatif

akibatnya

→ ΔG dapat kurang menguntungkan daripada ΔH

Contoh lain adalah dimer asam asetat. Dimerisasi dapat menguntungkan secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen, tetapi entropi translasi menurun karena dua monomer menjadi satu dimer. Oleh karena itu, ΔG harus dianalisis, bukan hanya ΔE atau ΔH .

11. Energi Bebas Gibbs dan Keseimbangan

Energi bebas Gibbs juga berhubungan dengan konstanta keseimbangan. Pada kondisi standar, hubungan antara ΔG° dan konstanta keseimbangan K adalah:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

dengan:

R = konstanta gas

T = suhu

K = konstanta keseimbangan

Jika ΔG° negatif, maka K lebih besar dari 1, sehingga produk lebih dominan pada keseimbangan. Jika ΔG° positif, maka K lebih kecil dari 1, sehingga reaktan lebih dominan.

Dalam Praktikum 7, hubungan ini tidak harus dihitung secara mendalam, tetapi penting untuk memahami makna ΔG . Energi bebas Gibbs bukan hanya angka abstrak, tetapi berkaitan dengan posisi keseimbangan reaksi.

Contoh:

ΔG° negatif

→ produk lebih menguntungkan secara termodinamika

→ K cenderung besar

ΔG° positif

→ reaktan lebih menguntungkan

→ K cenderung kecil

Namun, mahasiswa juga harus memahami bahwa perhitungan ΔG° dari kimia komputasi bergantung pada asumsi keadaan standar dan model yang digunakan.

12. Model Pelarut dalam Kimia Komputasi

Reaksi kimia sering berlangsung dalam pelarut. Oleh karena itu, perhitungan fase gas saja tidak selalu mencerminkan kondisi kimia nyata. Pelarut dapat menstabilkan spesies polar, bermuatan, atau keadaan transisi. Pelarut juga dapat mengubah energi relatif reaktan dan produk.

Dalam kimia komputasi, pelarut dapat dimodelkan dengan dua pendekatan utama:

1. **Model pelarut eksplisit**
2. **Model pelarut kontinu**

Dalam model pelarut eksplisit, molekul pelarut dimasukkan satu per satu ke dalam sistem. Pendekatan ini dapat menggambarkan ikatan hidrogen spesifik, orientasi pelarut, dan interaksi lokal. Namun, biayanya lebih besar dan memerlukan sampling konfigurasi.

Dalam model pelarut kontinu, pelarut diperlakukan sebagai medium kontinu dengan konstanta dielektrik tertentu. Molekul zat terlarut ditempatkan dalam rongga, dan pelarut merespons distribusi muatan zat terlarut secara elektrostatik. Pendekatan ini lebih sederhana dan praktis untuk banyak perhitungan.

Praktikum 7 menekankan model pelarut kontinu karena lebih mudah diterapkan dalam pembelajaran dasar.

13. Model Pelarut Kontinu

Model pelarut kontinu adalah pendekatan yang menggambarkan pelarut sebagai medium homogen yang memiliki sifat makroskopik, terutama konstanta dielektrik. Alih-alih memasukkan ratusan molekul pelarut secara eksplisit, model ini memperlakukan pelarut sebagai lingkungan kontinu di sekitar zat terlarut.

Secara konseptual:

```

zat terlarut
→ ditempatkan dalam rongga molekuler

pelarut
→ medium kontinu dengan konstanta dielektrik

interaksi elektrostatik
→ menstabilkan distribusi muatan zat terlarut

```

Model pelarut kontinu yang dikenal dalam kimia komputasi antara lain PCM, CPCM, COSMO, dan SMD. Masing-masing memiliki formulasi dan parameter berbeda, tetapi gagasan umumnya sama: pelarut dimodelkan sebagai medium yang merespons distribusi muatan zat terlarut.

Model kontinu sangat berguna untuk membandingkan fase gas dan pelarut. Misalnya, protonasi amonia dapat dihitung dalam fase gas dan dalam pelarut polar. Jika produk bermuatan lebih stabil dalam pelarut, hasil energi bebas dalam pelarut dapat berbeda signifikan dari fase gas.

Namun, model pelarut kontinu memiliki keterbatasan. Model ini tidak selalu menangkap ikatan hidrogen spesifik, struktur jaringan pelarut, efek mikrosolvasi, dan dinamika pelarut. Oleh karena itu, hasil model kontinu harus ditafsirkan secara kritis.

14. Peran Konstanta Dielektrik

Konstanta dielektrik adalah parameter penting dalam model pelarut kontinu. Pelarut polar memiliki konstanta dielektrik tinggi, sedangkan pelarut nonpolar memiliki konstanta dielektrik rendah. Semakin tinggi konstanta dielektrik, semakin kuat kemampuan medium untuk menstabilkan muatan atau dipol.

Secara konseptual:

pelarut polar
 → konstanta dielektrik tinggi
 → stabilisasi spesies bermuatan lebih besar

pelarut nonpolar
 → konstanta dielektrik rendah
 → stabilisasi muatan lebih kecil

Contoh:

air
 → pelarut polar
 → menstabilkan ion dan spesies polar

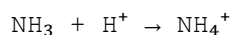
heksana
 → pelarut nonpolar
 → kurang menstabilkan ion

Dalam Praktikum 7, mahasiswa harus memahami bahwa efek pelarut tidak sama untuk semua molekul. Spesies netral nonpolar mungkin tidak banyak berubah energinya, sedangkan ion atau molekul sangat polar dapat mengalami stabilisasi besar.

15. Efek Pelarut terhadap Spesies Bermuatan

Pelarut polar dapat menurunkan energi spesies bermuatan karena interaksi elektrostatik antara muatan zat terlarut dan respons dielektrik pelarut. Spesies bermuatan menghasilkan medan listrik kuat. Pelarut polar merespons medan tersebut dan menstabilkan spesies tersebut.

Contoh penting adalah protonasi amonia:



Dalam fase gas, pembentukan ion bermuatan dapat memiliki karakter energi tertentu. Dalam pelarut polar, ion NH_4^+ dapat distabilkan lebih kuat. Karena itu, energi relatif dalam pelarut dapat berbeda dari fase gas.

Secara konseptual:



- bermuatan positif
- sangat dipengaruhi pelarut polar
- energi relatif dapat turun dalam model pelarut

Namun, mahasiswa harus berhati-hati. Reaksi protonasi yang melibatkan proton bebas memiliki kompleksitas tersendiri karena proton bebas tidak realistis sebagai spesies terisolasi dalam larutan. Dalam praktikum dasar, sistem ini digunakan sebagai model konseptual untuk memahami stabilisasi spesies bermuatan oleh pelarut.

16. Efek Pelarut terhadap Spesies Polar dan Ikatan Hidrogen

Selain spesies bermuatan, pelarut juga memengaruhi molekul polar dan sistem ikatan hidrogen. Molekul seperti formaldehida memiliki gugus C=O polar. Air, etanol, dan asam asetat dapat membentuk ikatan hidrogen. Pelarut dapat menstabilkan atau mengganggu interaksi antarmolekul bergantung jenis sistem.

Pada **hidrasi formaldehida**, pelarut dapat memengaruhi kestabilan reaktan dan produk karena reaksi melibatkan molekul polar dan pembentukan ikatan baru. Pada **dimer air**, pelarut dapat bersaing dengan pembentukan dimer karena molekul air dapat berinteraksi dengan pelarut. Pada **dimer asam asetat**, pelarut polar dapat melemahkan kecenderungan dimerisasi jika pelarut mampu menstabilkan monomer melalui interaksi kuat.

Secara konseptual:

dimerisasi

- menguntungkan jika interaksi antarmolekul kuat

pelarut polar

- dapat menstabilkan monomer
- dapat mengubah keseimbangan dimer-monomer

Model pelarut kontinu dapat menangkap sebagian efek elektrostatik, tetapi tidak selalu menangkap ikatan hidrogen spesifik antara pelarut dan zat terlarut. Untuk memahami ikatan hidrogen secara detail, kadang diperlukan molekul pelarut eksplisit.

17. Energi Solvasi

Energi solvasi adalah perubahan energi ketika suatu spesies dipindahkan dari fase gas ke pelarut. Secara sederhana:

$$\Delta G_{\text{solv}} = G_{\text{pelarut}} - G_{\text{fase_gas}}$$

Jika ΔG_{solv} negatif, spesies lebih stabil dalam pelarut dibanding fase gas. Nilai ini biasanya sangat negatif untuk ion dalam pelarut polar karena stabilisasi elektrostatik besar.

Dalam Praktikum 7, mahasiswa dapat membandingkan energi fase gas dan pelarut untuk melihat pengaruh lingkungan. Misalnya:

$G_{\text{fase\_gas}}(\text{NH}_4^+)$

$G_{\text{pelarut}}(\text{NH}_4^+)$

$$\Delta G_{\text{solv}}(\text{NH}_4^+) = G_{\text{pelarut}} - G_{\text{fase\_gas}}$$

Jika nilai ΔG_{solv} sangat negatif, maka pelarut menstabilkan NH_4^+ secara signifikan.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa energi solvasi dari model kontinu adalah hasil model. Nilainya bergantung pada parameter pelarut, bentuk rongga, metode, basis set, dan cara menghitung energi.

18. Keadaan Standar dan Koreksi Larutan

Dalam termodinamika komputasi, keadaan standar penting. Banyak output termokimia gas ideal menggunakan keadaan standar 1 atm. Dalam larutan, keadaan standar yang umum digunakan adalah 1 mol/L. Perbedaan keadaan standar dapat memengaruhi nilai energi bebas, terutama jika membandingkan hasil gas dan larutan.

Pada praktikum dasar, pembahasan keadaan standar dapat disederhanakan. Namun, mahasiswa perlu mengetahui bahwa ΔG hasil output tidak selalu langsung identik dengan ΔG eksperimen larutan tanpa koreksi. Untuk analisis lanjutan, koreksi 1 atm ke 1 M dapat diperlukan.

Konsep penting:

ΔG komputasi

→ bergantung pada keadaan standar dan model

perbandingan fase gas dan larutan

→ harus memperhatikan asumsi keadaan standar

Untuk Praktikum 7, mahasiswa cukup diminta menyebutkan bahwa hasil energi bebas dalam pelarut bersifat model dan bergantung pada asumsi keadaan standar. Ini melatih sikap kritis tanpa membebani praktikum dengan koreksi lanjutan yang terlalu teknis.

19. Sistem Reaksi Model dalam Perspektif Teori

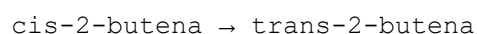
Sistem reaksi model dalam Praktikum 7 dapat dipetakan terhadap konsep teorinya.

Sistem Model	Konsep Teori Utama
Isomerisasi cis-trans 2-butena	Energi relatif isomer, efek sterik
Protonasi amonia	Energi reaksi, spesies bermuatan, efek pelarut
Hidrasi formaldehida	Reaksi adisi, polaritas, energi bebas
Dimer air	Ikatan hidrogen, entalpi vs entropi
Konformer etanol	Kestabilan relatif konformer
Asam asetat monomer-dimer	Dimerisasi, ikatan hidrogen, penalti entropi

Tabel ini menunjukkan bahwa setiap sistem model dipilih untuk mengajarkan konsep tertentu. Praktikum 7 tidak hanya menghitung angka, tetapi menggunakan angka untuk menjelaskan fenomena kimia.

20. Contoh Teoretis: Isomerisasi cis-trans 2-butena

Isomerisasi cis-trans 2-butena adalah contoh perbandingan isomer. Reaksi konseptualnya:



Energi reaksi:

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

Jika ΔE negatif, trans lebih stabil daripada cis. Secara kimia, trans-2-butena lebih stabil karena gugus metil berjauhan sehingga tolakan sterik lebih kecil.

Analisis termodinamika dapat diperluas:

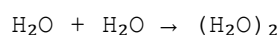
$$\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$$

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

Karena cis dan trans memiliki jumlah atom sama dan bentuk molekul relatif mirip, kontribusi entropi mungkin tidak sebesar pada reaksi asosiasi. Namun, ΔG tetap harus dihitung jika ingin menilai kestabilan termodinamika secara lebih lengkap.

21. Contoh Teoretis: Dimer Air

Dimer air adalah contoh pembentukan kompleks melalui ikatan hidrogen:



Energi elektronik dimerisasi:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Jika ΔE negatif, pembentukan dimer menguntungkan secara energi elektronik. Namun, ΔG dapat kurang menguntungkan karena dua molekul bebas menjadi satu kompleks, sehingga entropi translasi menurun.

Secara konseptual:

ikatan hidrogen terbentuk
→ entalpi menguntungkan

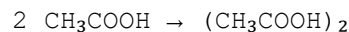
dua molekul menjadi satu
→ entropi menurun

hasil akhir
→ ΔG dapat berbeda dari ΔE dan ΔH

Dimer air sangat baik untuk menunjukkan mengapa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG .

22. Contoh Teoretis: Asam Asetat Monomer dan Dimer

Asam asetat dapat membentuk dimer melalui dua ikatan hidrogen. Reaksi konseptual:



Pembentukan dimer sering menguntungkan secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen. Namun, proses ini mengurangi jumlah partikel bebas, sehingga entropi menurun.

Analisis:

ΔE dimerisasi
→ menunjukkan energi interaksi elektronik

ΔH dimerisasi
→ memasukkan koreksi termal

ΔG dimerisasi
→ memasukkan penalti entropi

Dalam pelarut polar, kecenderungan dimerisasi dapat berubah karena pelarut dapat menstabilkan monomer melalui interaksi dengan gugus asam karboksilat. Model pelarut kontinu dapat menunjukkan sebagian efek ini, meskipun tidak selalu menangkap ikatan hidrogen spesifik secara eksplisit.

23. Analisis Kritis terhadap Termodinamika Komputasi

Perhitungan termodinamika komputasi sangat berguna, tetapi memiliki keterbatasan.

Pertama, hasil bergantung pada metode dan basis set. HF, DFT, dan metode lain dapat menghasilkan energi relatif yang berbeda.

Kedua, koreksi termal dari analisis frekuensi biasanya menggunakan pendekatan osilator harmonik dan gas ideal. Pendekatan ini tidak selalu akurat untuk mode frekuensi rendah, rotasi internal, atau sistem fleksibel.

Ketiga, entropi gas ideal dapat memberikan penalti besar untuk reaksi asosiasi. Dalam larutan, interpretasi entropi dapat berbeda karena gerak translasi dan interaksi pelarut tidak sama dengan fase gas.

Keempat, model pelarut kontinu tidak menangkap semua interaksi spesifik, seperti ikatan hidrogen eksplisit, orientasi pelarut, jaringan pelarut, dan dinamika pelarut.

Kelima, hasil energi bebas larutan dapat bergantung pada keadaan standar dan koreksi konsentrasi.

Keenam, perbandingan energi sangat sensitif terhadap konsistensi metode. Reaktan dan produk harus dihitung pada level teori yang sama.

Dengan demikian, mahasiswa harus menulis analisis yang hati-hati. Angka ΔE , ΔH , dan ΔG harus dibaca sebagai hasil model, bukan kebenaran absolut tanpa batas.

24. Prinsip Praktis Menggunakan Dasar Teori dalam Laporan

Dalam laporan Praktikum 7, dasar teori harus diterapkan secara langsung pada data. Mahasiswa tidak cukup menulis definisi umum. Mereka harus menunjukkan bagaimana definisi itu digunakan.

Contoh penerapan:

Energi elektronik digunakan untuk menghitung ΔE .
 Entalpi digunakan untuk menghitung ΔH .
 Energi bebas Gibbs digunakan untuk menghitung ΔG .
 Faktor entropi digunakan untuk menjelaskan perbedaan ΔH dan ΔG .
 Model pelarut digunakan untuk membandingkan fase gas dan larutan.

Format analisis yang baik:

Sistem:
 Reaktan:
 Produk:
 Metode:
 Basis set:
 Model pelarut:
 E_reaktan:
 E_produk:
 ΔE :
 ΔH :

ΔG :
 Interpretasi:
 Keterbatasan:

Dengan format ini, mahasiswa dapat menghubungkan teori dan output secara sistematis.

25. Sintesis Dasar Teori Praktikum 7

Sintesis dasar teori Praktikum 7 dapat diringkas sebagai berikut:

energi elektronik
 → dasar perhitungan ΔE

frekuensi vibrasi
 → dasar ZPE, entalpi, dan entropi

entalpi
 → energi termal reaksi

entropi
 → kontribusi ketersebaran keadaan mikro

energi bebas Gibbs
 → kriteria termodinamika pada T dan P tetap

model pelarut kontinu
 → pendekatan untuk menilai pengaruh pelarut

Alur lengkapnya:

optimasi geometri
 → energi elektronik
 → frekuensi
 → ZPE
 → H
 → S
 → G
 → ΔE , ΔH , ΔG
 → perbandingan fase gas dan pelarut
 → analisis kestabilan

Dengan memahami alur ini, mahasiswa siap menjalankan Praktikum 7 secara benar. Mereka tidak hanya menghitung angka, tetapi mengetahui makna setiap angka dan batas penggunaannya.

26. Transisi ke Software yang Digunakan

Subbab 10.2 telah membahas dasar teori Praktikum 7, meliputi energi elektronik, zero-point energy, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs, dan model pelarut kontinu. Pembahasan ini menunjukkan bahwa perhitungan energi reaksi memerlukan pemahaman berlapis: energi elektronik untuk ΔE , koreksi termal untuk ΔH , entropi untuk ΔG , serta model pelarut untuk membandingkan kestabilan spesies dalam fase gas dan pelarut.

Subbab berikutnya akan membahas software yang digunakan dalam Praktikum 7, yaitu ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, dan Python. Software tersebut akan digunakan untuk menghitung energi reaktan dan produk, mengambil data termokimia dari output, membandingkan fase gas dan pelarut, serta mengolah data menjadi tabel dan diagram energi reaksi.

10.3 Software yang Digunakan

Software yang digunakan dalam Praktikum 7 dipilih untuk mendukung perhitungan **energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, dan efek pelarut** secara sistematis. Praktikum ini tidak hanya memerlukan software untuk menghitung energi elektronik, tetapi juga membutuhkan perangkat yang mampu melakukan optimasi geometri, perhitungan frekuensi, pengambilan koreksi termokimia, penggunaan model pelarut, pengolahan data energi, konversi satuan, dan pembuatan diagram energi reaksi.

Software yang digunakan dalam Praktikum 7 adalah:

1. **ChemCompute**
2. **GAMESS**
3. **ORCA**
4. **Gaussian**
5. **Psi4**
6. **PySCF**
7. **Python**

Ketujuh perangkat ini memiliki peran yang saling melengkapi. ChemCompute berfungsi sebagai jalur berbasis web untuk memudahkan akses perhitungan kimia kuantum. GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan PySCF berfungsi sebagai paket komputasi struktur elektronik yang dapat menghitung energi molekul. Python digunakan sebagai alat pengolahan data energi, perhitungan ΔE , ΔH , ΔG , konversi Hartree ke kJ/mol, perbandingan fase gas dan pelarut, serta pembuatan diagram energi reaksi.

Dalam Praktikum 7, software tidak boleh dipahami sebagai “mesin penghasil angka” semata. Software adalah alat ilmiah yang bekerja berdasarkan model, metode, basis set, dan asumsi tertentu. Jika metode tidak konsisten, jika basis set berbeda, jika muatan salah, jika multiplicity tidak tepat, atau jika model pelarut tidak dicatat, maka hasil energi reaksi dapat menyesatkan. Karena itu, pemilihan dan penggunaan software harus selalu disertai pemahaman metodologis.

Alur umum penggunaan software dalam Praktikum 7 adalah:

```
struktur reaktan dan produk
→ optimasi geometri
→ perhitungan frekuensi
→ energi elektronik
→ ZPE, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs
→ perhitungan fase gas dan pelarut
→ pengolahan data dengan Python
→ tabel  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ 
→ diagram energi reaksi
```

Alur tersebut menunjukkan bahwa Praktikum 7 merupakan integrasi antara kimia kuantum, termodinamika, kimia larutan, dan analisis data.

1. Prinsip Pemilihan Software

Software dalam Praktikum 7 dipilih berdasarkan beberapa prinsip.

Pertama, software harus mampu menghitung **energi elektronik**. Energi elektronik adalah dasar untuk menghitung ΔE . Tanpa energi elektronik, mahasiswa tidak dapat membandingkan kestabilan reaktan, produk, isomer, konformer, monomer, atau dimer.

Kedua, software sebaiknya mampu melakukan **optimasi geometri**. Perhitungan energi reaksi harus dilakukan pada struktur yang telah dioptimasi. Energi dari struktur awal yang belum teroptimasi tidak layak digunakan untuk analisis termodinamika.

Ketiga, software perlu mendukung **perhitungan frekuensi**. Perhitungan frekuensi diperlukan untuk memperoleh zero-point energy, koreksi termal entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs. Tanpa frekuensi, analisis termokimia menjadi tidak lengkap.

Keempat, software sebaiknya mendukung **model pelarut**, baik melalui PCM, CPCM, COSMO, SMD, atau pendekatan lain yang tersedia. Model pelarut diperlukan untuk membandingkan hasil fase gas dan pelarut.

Kelima, software harus memungkinkan mahasiswa mengambil data output secara jelas. Energi elektronik, entalpi, energi bebas Gibbs, dan informasi pelarut harus dapat ditemukan dalam output.

Keenam, software harus dapat diintegrasikan dengan Python. Python digunakan untuk menghitung selisih energi, melakukan konversi satuan, membuat tabel, menyimpan CSV, dan membuat diagram energi.

Dengan prinsip tersebut, Praktikum 7 tidak bergantung pada satu software saja. Jika satu software tidak tersedia, mahasiswa dapat menggunakan software lain selama metode, basis set, dan prosedurnya konsisten.

2. Tabel Peran Software dalam Praktikum 7

Peran masing-masing software dapat diringkas sebagai berikut:

Software	Peran Utama	Output yang Diperlukan
ChemCompute	Jalur web untuk optimasi, frekuensi, dan energi	Energi elektronik, ZPE, H, G jika tersedia
GAMESS	Paket kimia kuantum untuk energi, optimasi, frekuensi	Energi, koreksi termal, output reaksi
ORCA	Paket kimia kuantum untuk DFT, optimasi, frekuensi, pelarut	Energi elektronik, frekuensi, termokimia
Gaussian	Paket kimia komputasi untuk optimasi, frekuensi, termokimia, pelarut	Energi, ZPE, H, G, model pelarut
Psi4	Paket komputasi modern berbasis input skrip dan Python	Energi elektronik, optimasi, integrasi data
PySCF	Library Python untuk struktur elektronik dan eksperimen metode	Energi elektronik, workflow berbasis Python
Python	Analisis data energi dan visualisasi	ΔE , ΔH , ΔG , grafik, CSV

Tabel tersebut menunjukkan bahwa software komputasi menghasilkan data energi, sedangkan Python mengolah data tersebut menjadi hasil analisis praktikum. Pembagian ini penting agar mahasiswa tidak keliru menganggap Python sebagai pengganti seluruh paket kimia kuantum. Dalam Praktikum 7, Python terutama digunakan untuk analisis data, bukan untuk menggantikan seluruh prosedur perhitungan struktur elektronik.

3. ChemCompute sebagai Jalur Berbasis Web

ChemCompute digunakan sebagai jalur berbasis web untuk menjalankan perhitungan energi reaksi dan termodinamika. Platform ini berguna terutama bagi mahasiswa yang belum memiliki instalasi lokal GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF. Dengan ChemCompute, mahasiswa dapat melakukan perhitungan dasar melalui antarmuka web, mengunggah atau membangun struktur, memilih metode yang tersedia, menjalankan optimasi, dan mengambil output.

Peran ChemCompute dalam Praktikum 7 meliputi:

1. Menyediakan akses perhitungan berbasis web.
2. Membantu mahasiswa menjalankan optimasi geometri.
3. Membantu memperoleh energi elektronik.
4. Membantu menjalankan perhitungan frekuensi jika tersedia.
5. Membantu memperoleh data ZPE, entalpi, dan energi bebas Gibbs jika output mendukung.
6. Membantu membandingkan energi reaktan dan produk.
7. Menjadi jalur awal sebelum mahasiswa menggunakan software lokal.

Namun, ChemCompute harus dipahami sebagai **platform**, bukan metode. Mahasiswa tidak boleh menulis bahwa “metode yang digunakan adalah ChemCompute”. Pernyataan tersebut tidak tepat karena ChemCompute hanyalah lingkungan untuk menjalankan perhitungan. Metode sebenarnya dapat berupa HF, DFT, semiempiris, atau metode lain yang tersedia melalui platform.

Pernyataan yang lebih tepat:

Perhitungan dilakukan melalui ChemCompute menggunakan paket dan metode yang tersedia. Energi reaktan dan produk dihitung dengan metode, basis set, muatan, multiplicity, dan model pelarut yang sama.

Data minimum yang harus dicatat dari ChemCompute:

Data	Keterangan
Nama sistem	Misalnya cis-2-butena, trans-2-butena, NH_3 , NH_4^+
Metode	Misalnya HF atau DFT
Basis set	Misalnya 6-31G(d) atau basis lain
Muatan	Sesuai spesies
Multiplicity	Sesuai keadaan elektronik
Kondisi	Fase gas atau pelarut
Energi elektronik	Dalam Hartree
ZPE	Jika tersedia
Entalpi	Jika tersedia
Energi bebas Gibbs	Jika tersedia
Status optimasi	Konvergen atau tidak
Frekuensi imajiner	Ada atau tidak

ChemCompute cocok untuk pembelajaran karena memudahkan akses. Namun, kemudahan ini dapat menimbulkan risiko “kotak hitam”. Mahasiswa dapat tergoda hanya menyalin angka energi tanpa membaca metode dan output. Karena itu, penggunaan ChemCompute harus disertai disiplin pencatatan dan validasi.

4. GAMESS untuk Perhitungan Energi dan Termokimia

GAMESS merupakan paket kimia kuantum yang dapat digunakan untuk menghitung energi elektronik, optimasi geometri, dan frekuensi vibrasi. Dalam Praktikum 7, GAMESS dapat digunakan untuk menghitung energi reaktan dan produk pada sistem model seperti isomerisasi cis-trans 2-butena, protonasi amonia, hidrasi formaldehida, dimer air, konformer etanol, serta monomer dan dimer asam asetat.

Peran GAMESS dalam Praktikum 7 meliputi:

1. Menghitung energi elektronik.
2. Mengoptimasi geometri.

3. Menghitung frekuensi vibrasi.
4. Memberikan koreksi termokimia jika perhitungan frekuensi dilakukan.
5. Membantu menghitung energi relatif reaktan dan produk.
6. Menyediakan output teks yang dapat dianalisis secara rinci.

GAMESS memiliki nilai pedagogis karena output-nya mengajarkan mahasiswa membaca data komputasi secara teknis. Mahasiswa perlu mencari bagian energi total, status konvergensi, frekuensi, koreksi termal, dan informasi lain. Keterampilan membaca output teks sangat penting dalam kimia komputasi karena tidak semua informasi dapat dipahami dari antarmuka visual.

Dalam laporan, jika menggunakan GAMESS, mahasiswa harus menuliskan:

Energi reaktan dan produk dihitung menggunakan GAMESS dengan metode dan basis set yang sama. Struktur dioptimasi terlebih dahulu, kemudian dilakukan perhitungan frekuensi untuk memperoleh koreksi termokimia.

Kesalahan yang harus dihindari adalah mengambil energi dari struktur yang belum dioptimasi atau mencampur energi dari metode berbeda. Misalnya, energi cis-2-butena tidak boleh dibandingkan dengan energi trans-2-butena jika keduanya dihitung dengan basis set berbeda.

5. ORCA untuk Energi, Frekuensi, dan Model Pelarut

ORCA merupakan paket kimia kuantum yang banyak digunakan untuk perhitungan DFT, optimasi geometri, frekuensi, dan berbagai sifat molekul. Dalam Praktikum 7, ORCA dapat digunakan untuk menghitung energi elektronik, melakukan optimasi, menjalankan perhitungan frekuensi, serta menerapkan model pelarut jika tersedia dalam instalasi dan input yang digunakan.

Peran ORCA dalam Praktikum 7:

1. Menghitung energi elektronik reaktan dan produk.
2. Mengoptimasi struktur molekul.
3. Menghitung frekuensi dan koreksi termokimia.
4. Menggunakan model pelarut untuk membandingkan fase gas dan pelarut.
5. Menghasilkan output yang dapat diolah dengan Python.
6. Mendukung workflow berbasis terminal.

Contoh input konseptual ORCA untuk optimasi dan frekuensi sederhana:

```
! B3LYP 6-31G(d) Opt Freq
* xyz 0 1
...
*
```


Untuk model pelarut, input dapat disesuaikan dengan fasilitas pelarut yang tersedia pada ORCA. Yang penting dalam praktikum bukan menghafal satu bentuk input tertentu, tetapi memahami bahwa kondisi fase gas dan pelarut harus dihitung secara konsisten.

Alur penggunaan ORCA:

```
struktur awal
→ file input ORCA
→ optimasi geometri
→ frekuensi
→ energi elektronik, H, G
→ output
→ Python untuk  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ 
```

ORCA sangat baik untuk melatih mahasiswa menggunakan komputasi lokal. Namun, mahasiswa perlu memahami penggunaan terminal, struktur file input, folder kerja, dan pembacaan output. Kesalahan kecil dalam muatan, multiplicity, atau keyword dapat menghasilkan output yang tidak sesuai.

6. Gaussian untuk Energi Reaksi, Termokimia, dan Pelarut

Gaussian merupakan paket kimia komputasi yang banyak digunakan dalam penelitian dan pembelajaran struktur elektronik. Dalam Praktikum 7, Gaussian dapat digunakan untuk optimasi geometri, perhitungan frekuensi, pengambilan ZPE, entalpi, energi bebas Gibbs, serta penggunaan model pelarut. Jika digunakan bersama GaussView, Gaussian juga memudahkan pembuatan struktur awal dan pemeriksaan output.

Peran Gaussian dalam Praktikum 7:

1. Menghitung energi elektronik.
2. Mengoptimasi geometri.
3. Menghitung frekuensi vibrasi.
4. Memberikan ZPE, koreksi entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs.
5. Mendukung model pelarut melalui keyword yang sesuai.
6. Menghasilkan output yang dapat digunakan untuk analisis reaksi.
7. Membantu validasi struktur melalui frekuensi imajiner.

Contoh input konseptual Gaussian:

```
%chk=sistem.chk
# B3LYP/6-31G(d) Opt Freq
```

Judul perhitungan

```
0 1
...
```

Untuk model pelarut, keyword dapat ditambahkan sesuai kebutuhan dan ketersediaan metode. Dalam laporan, mahasiswa harus mencatat apakah perhitungan dilakukan dalam fase gas atau dengan model pelarut.

Pernyataan metodologis yang baik:

Optimasi geometri dan perhitungan frekuensi dilakukan dengan Gaussian pada level teori yang sama untuk semua reaktan dan produk. Nilai energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs diambil dari output perhitungan frekuensi.

Gaussian memiliki kelebihan dalam ekosistem visual dan output termokimia yang luas. Namun, penggunaan Gaussian harus memperhatikan lisensi resmi. Dalam konteks akademik, integritas penggunaan software sama pentingnya dengan ketepatan perhitungan.

7. Psi4 untuk Perhitungan Energi Berbasis Skrip

Psi4 merupakan paket kimia kuantum modern yang dapat digunakan untuk perhitungan energi elektronik, optimasi, dan berbagai metode struktur elektronik. Salah satu keunggulan Psi4 adalah integrasinya yang baik dengan workflow berbasis Python. Hal ini membuat Psi4 menarik untuk pembelajaran yang menggabungkan kimia komputasi dan pemrograman.

Peran Psi4 dalam Praktikum 7:

1. Menghitung energi elektronik.
2. Mengoptimasi geometri jika diperlukan.
3. Mendukung workflow berbasis skrip.
4. Memudahkan pengambilan energi untuk analisis Python.
5. Cocok untuk pembelajaran komputasi yang terprogram dan reproduibel.

Dalam Praktikum 7, Psi4 dapat digunakan untuk menghitung energi reaktan dan produk, kemudian data energi tersebut diolah lebih lanjut dengan Python. Jika perhitungan termokimia lengkap tidak dilakukan dalam Psi4 pada jalur tertentu, mahasiswa tetap dapat menggunakan energi elektronik sebagai data ΔE , lalu membahas keterbatasannya.

Contoh alur konseptual Psi4:

```
definisi molekul
→ pilih metode dan basis set
→ hitung energi
→ simpan energi
→ ulangi untuk produk
→ hitung  $\Delta E$  dengan Python
```

Psi4 sangat baik untuk mengajarkan bahwa kimia komputasi dapat dilakukan secara reproduibel melalui skrip. Namun, mahasiswa harus tetap memahami bahwa energi yang diambil dari Psi4

harus dibandingkan secara konsisten. Jika reaktan dan produk dihitung dengan metode berbeda, hasil ΔE tidak valid.

8. PySCF untuk Eksperimen Struktur Elektronik Berbasis Python

PySCF merupakan pustaka Python untuk perhitungan struktur elektronik. Dalam Praktikum 7, PySCF dapat digunakan untuk memperkenalkan pendekatan komputasi yang lebih terprogram. Dengan PySCF, mahasiswa dapat mendefinisikan molekul, memilih metode, menghitung energi, dan mengintegrasikan hasilnya secara langsung dalam workflow Python.

Peran PySCF dalam Praktikum 7:

1. Menghitung energi elektronik.
2. Melatih workflow berbasis kode.
3. Menghubungkan perhitungan struktur elektronik dengan analisis data Python.
4. Membantu mahasiswa memahami hubungan antara input molekul, metode, basis set, dan energi.
5. Menjadi jalur lanjutan bagi mahasiswa yang ingin memahami komputasi secara lebih mendalam.

Contoh konseptual penggunaan PySCF:

```
definisikan atom dan koordinat
→ tentukan basis set
→ pilih metode
→ hitung energi elektronik
→ simpan hasil
→ bandingkan reaktan dan produk
```

PySCF sangat berguna untuk pendidikan komputasi karena mahasiswa dapat melihat proses perhitungan dalam bentuk kode. Namun, untuk praktikum dasar, PySCF sebaiknya digunakan secara terbatas dan terarah. Mahasiswa perlu memahami bahwa beberapa fitur termokimia dan pelarut mungkin memerlukan pengaturan tambahan. Oleh karena itu, PySCF dalam Praktikum 7 dapat difokuskan pada energi elektronik dan integrasi data dengan Python.

9. Python sebagai Alat Analisis Data Energi

Python digunakan sebagai alat analisis utama setelah data energi diperoleh dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF. Dalam Praktikum 7, Python wajib memuat:

1. Input energi reaktan dan produk.
2. Perhitungan ΔE .
3. Perhitungan ΔH .

4. Perhitungan ΔG .
5. Konversi satuan Hartree ke kJ/mol.
6. Perbandingan fase gas dan pelarut.
7. Diagram energi reaksi.

Python berperan sebagai penghubung antara output software dan laporan praktikum. Tanpa Python, mahasiswa masih dapat menghitung secara manual, tetapi risiko kesalahan lebih besar, terutama jika sistem reaksi banyak dan melibatkan beberapa jenis energi.

Alur Python dalam Praktikum 7:

```
energi reaktan dan produk
→ input tabel
→ hitung selisih energi
→ konversi Hartree ke kJ/mol
→ bandingkan fase gas dan pelarut
→ buat diagram energi
→ simpan CSV
```

Python tidak menggantikan teori termodinamika. Python hanya membantu menghitung dan memvisualisasikan. Mahasiswa tetap harus menjelaskan makna ΔE , ΔH , ΔG , dan pengaruh pelarut.

10. Mengapa Python Penting dalam Praktikum 7

Python penting karena perhitungan energi reaksi melibatkan banyak angka. Misalnya, untuk satu reaksi mahasiswa dapat memiliki energi elektronik reaktan, energi elektronik produk, entalpi reaktan, entalpi produk, energi bebas Gibbs reaktan, energi bebas Gibbs produk, baik dalam fase gas maupun pelarut. Jika ada enam sistem model, jumlah data menjadi cukup banyak.

Tanpa pengolahan data yang rapi, mahasiswa mudah salah menyalin angka, salah mengonversi satuan, atau salah menghitung selisih energi. Python membantu mengurangi kesalahan tersebut.

Keunggulan Python:

1. Menghitung selisih energi secara otomatis.
2. Mengonversi satuan secara konsisten.
3. Menyimpan hasil dalam CSV.
4. Membuat grafik energi reaksi.
5. Membandingkan fase gas dan pelarut.
6. Memudahkan pengecekan ulang.
7. Mendukung reproduisibilitas.

Contoh alur data:

```
data_energi_reaktan_produk.csv
→ praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

→ tabel_delta_energi.csv
 → diagram_energi_reaksi.png
 → laporan praktikum

Dengan alur ini, laporan menjadi berbasis data dan dapat diverifikasi.

11. Konsistensi Level Teori dalam Semua Software

Salah satu prinsip paling penting dalam Praktikum 7 adalah konsistensi level teori. Software boleh berbeda, tetapi dalam satu perbandingan energi reaksi, metode dan basis set harus konsisten. Jika reaktan dihitung dengan satu metode dan produk dihitung dengan metode lain, maka selisih energi tidak valid.

Konsistensi yang harus dijaga:

Aspek	Harus Konsisten
Metode	Sama untuk reaktan dan produk
Basis set	Sama untuk reaktan dan produk
Model pelarut	Sama dalam satu kondisi perbandingan
Muatan	Sesuai spesies
Multiplicity	Sesuai keadaan elektronik
Kriteria optimasi	Sebaiknya sebanding
Koreksi termal	Diambil dari prosedur yang sama
Satuan	Diseragamkan

Contoh salah:

cis-2-butena dihitung dengan HF/STO-3G
 trans-2-butena dihitung dengan B3LYP/6-31G(d)

ΔE dibandingkan langsung
 → tidak valid

Contoh benar:

cis-2-butena dihitung dengan B3LYP/6-31G(d)
 trans-2-butena dihitung dengan B3LYP/6-31G(d)

ΔE dibandingkan
 → valid secara metodologis

Mahasiswa harus memahami bahwa konsistensi lebih penting daripada sekadar memilih software yang “terlihat canggih”.

12. Data yang Harus Diambil dari Output Software

Dari setiap output software, mahasiswa perlu mengambil data minimum berikut:

1. Nama sistem.
2. Nama spesies.
3. Metode.
4. Basis set.
5. Muatan.
6. Multiplicity.
7. Kondisi fase gas atau pelarut.
8. Energi elektronik.
9. ZPE jika tersedia.
10. Entalpi jika tersedia.
11. Energi bebas Gibbs jika tersedia.
12. Status optimasi.
13. Frekuensi imajiner.
14. Catatan model pelarut.
15. Nama file output.

Format tabel data mentah:

Sistem	Spesies	Kondisi	E elektronik	H	G	Satuan	Status
cis-trans 2-butena	cis	gas	...	...	...	Hartree	valid
cis-trans 2-butena	trans	gas	...	...	...	Hartree	valid
protonasi amonia	NH ₃	gas	...	...	...	Hartree	valid
protonasi amonia	NH ₄ ⁺	pelarut	...	...	...	Hartree	valid

Data seperti ini akan menjadi input untuk Python.

13. Validasi Output Sebelum Analisis

Sebelum data energi digunakan, mahasiswa harus melakukan validasi. Validasi ini penting karena angka energi dari output yang tidak valid dapat menghasilkan kesimpulan yang salah.

Daftar validasi:

- [] Struktur telah dioptimasi.
- [] Optimasi konvergen.
- [] Tidak ada frekuensi imajiner untuk minimum.
- [] Metode dan basis set tercatat.
- [] Muatan benar.
- [] Multiplicity benar.
- [] Energi elektronik terbaca jelas.
- [] H dan G diambil dari output yang tepat.

- [] Model pelarut dicatat.
- [] Satuan energi diketahui.
- [] Semua spesies dalam satu reaksi dihitung secara konsisten.

Jika sistem adalah keadaan transisi, satu frekuensi imajiner dapat bermakna. Namun, Praktikum 7 tidak berfokus pada keadaan transisi. Sistem yang dianalisis adalah reaktan, produk, isomer, konformer, monomer, dan dimer. Oleh karena itu, struktur minimum seharusnya tidak memiliki frekuensi imajiner.

14. Software dan Efek Pelarut

Efek pelarut merupakan bagian penting Praktikum 7. Tidak semua software atau jalur praktikum memiliki cara yang sama untuk memasukkan pelarut. Beberapa software menyediakan model pelarut kontinu seperti PCM, CPCM, COSMO, atau SMD. Mahasiswa harus menggunakan model yang tersedia dan mencatatnya dengan jelas.

Data pelarut yang harus dicatat:

Data Pelarut	Contoh Keterangan
Model pelarut	PCM, CPCM, COSMO, SMD, atau lainnya
Nama pelarut	Air, etanol, aseton, atau lainnya
Konstanta dielektrik	Jika tersedia dalam output
Kondisi	Fase gas atau pelarut
Software	ORCA, Gaussian, GAMESS, atau lainnya
Catatan	Apakah pelarut eksplisit atau kontinu

Dalam laporan, mahasiswa harus membedakan:

fase gas
→ tanpa model pelarut

fase pelarut
→ menggunakan model pelarut kontinu atau pendekatan lain

Jika reaksi melibatkan spesies bermuatan, efek pelarut dapat sangat besar. Karena itu, protonasi amonia menjadi sistem model penting untuk membahas stabilisasi ion oleh pelarut polar.

15. Keterbatasan Software dalam Model Pelarut

Model pelarut dalam software memiliki keterbatasan. Model pelarut kontinu dapat menggambarkan stabilisasi elektrostatik secara praktis, tetapi tidak selalu mampu menggambarkan interaksi spesifik seperti ikatan hidrogen langsung antara pelarut dan zat terlarut.

Contoh:

etanol dalam pelarut air
→ dapat membentuk ikatan hidrogen spesifik

model pelarut kontinu
→ menangkap efek dielektrik umum
→ belum tentu menangkap satu ikatan hidrogen tertentu

Untuk menggambarkan interaksi spesifik, kadang diperlukan molekul pelarut eksplisit. Namun, pelarut eksplisit meningkatkan kompleksitas karena jumlah konfigurasi yang mungkin sangat banyak. Oleh karena itu, Praktikum 7 menggunakan model pelarut kontinu sebagai pendekatan awal.

Mahasiswa harus menulis analisis kritis:

Model pelarut kontinu dapat menunjukkan kecenderungan stabilisasi spesies polar atau bermuatan, tetapi tidak menggambarkan struktur pelarut secara eksplisit. Oleh karena itu, hasilnya harus ditafsirkan sebagai pendekatan, bukan gambaran lengkap larutan nyata.

16. Hubungan Software dengan Sistem Reaksi Model

Setiap software dapat digunakan untuk beberapa sistem model, tetapi tingkat kemudahannya berbeda. Sistem reaksi model dalam Praktikum 7 dapat dipetakan sebagai berikut:

Sistem Model	Software yang Cocok	Fokus
Isomerisasi cis-trans 2-butena	ChemCompute, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF	Energi relatif isomer
Protonasi amonia	ChemCompute, ORCA, Gaussian, GAMESS	Energi reaksi dan efek pelarut
Hidrasi formaldehida	ChemCompute, ORCA, Gaussian	ΔE , ΔH , ΔG
Dimer air	ORCA, Gaussian, GAMESS, Psi4	Ikatan hidrogen dan entropi
Konformer etanol	ChemCompute, ORCA, Gaussian, Psi4	Energi relatif konformer
Asam asetat monomer-dimer	ORCA, Gaussian, GAMESS	Dimerisasi dan pelarut

Tabel tersebut tidak membatasi software secara mutlak. Mahasiswa dapat menggunakan software lain selama memenuhi syarat: metode konsisten, output jelas, dan data energi dapat diambil.

17. Contoh Alur Software untuk Isomerisasi cis-trans 2-butena

Untuk isomerisasi cis-trans 2-butena, alur software dapat ditulis:

buat struktur cis-2-butena
 → optimasi geometri
 → frekuensi
 → ambil E, H, G

buat struktur trans-2-butena
 → optimasi geometri
 → frekuensi
 → ambil E, H, G

Python
 → hitung ΔE , ΔH , ΔG
 → buat diagram energi

Rumus:

$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$
 $\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$
 $\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$

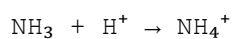
Jika nilai negatif, trans lebih stabil daripada cis pada besaran yang dihitung.

Analisis yang diharapkan:

Trans-2-butena lebih stabil jika energinya lebih rendah daripada cis-2-butena. Perbedaan kestabilan dapat dikaitkan dengan tolakan sterik gugus metil yang lebih kecil pada isomer trans.

18. Contoh Alur Software untuk Protonasi Amonia

Untuk protonasi amonia, reaksi modelnya:



Alur software:

hitung NH_3 fase gas
 hitung NH_4^+ fase gas
 hitung NH_3 dalam pelarut
 hitung NH_4^+ dalam pelarut
 olah energi dengan Python
 bandingkan ΔG fase gas dan pelarut

Sistem ini penting untuk membahas efek pelarut terhadap spesies bermuatan. NH_4^+ sebagai ion positif dapat distabilkan oleh pelarut polar. Oleh karena itu, hasil fase gas dan pelarut dapat berbeda.

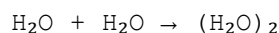
Catatan kritis penting:

Proton bebas adalah model ideal dan tidak sepenuhnya merepresentasikan keadaan proton dalam larutan. Dalam larutan nyata, proton biasanya tersolvasi. Karena itu, sistem protonasi amonia dalam praktikum digunakan sebagai model konseptual untuk memahami stabilisasi spesies bermuatan.

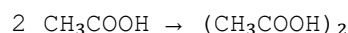
Pernyataan ini menunjukkan kehati-hatian ilmiah.

19. Contoh Alur Software untuk Dimer Air dan Dimer Asam Asetat

Dimer air:



Dimer asam asetat:



Alur software:

```
optimasi monomer
→ frekuensi monomer
→ energi monomer
```

```
optimasi dimer
→ frekuensi dimer
→ energi dimer
```

```
Python
→ ΔE = E_dimer - 2E_monomer
→ ΔH = H_dimer - 2H_monomer
→ ΔG = G_dimer - 2G_monomer
```

Dimerisasi sering menguntungkan secara energi elektronik atau entalpi karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, ΔG dapat menjadi kurang menguntungkan karena dua molekul bebas menjadi satu kompleks, sehingga entropi translasi menurun.

Software yang digunakan harus mampu menangani struktur dimer dengan baik. Geometri awal dimer harus dibuat wajar agar optimasi tidak menghasilkan struktur yang salah.

20. Integrasi Output Software dengan Python

Semua output software akhirnya harus diintegrasikan dengan Python. Integrasi ini dilakukan melalui input manual atau file CSV. Untuk praktikum dasar, mahasiswa dapat menyalin energi dari output ke tabel CSV. Untuk workflow lanjutan, parsing otomatis output dapat dikembangkan, tetapi tidak wajib.

Format CSV yang dianjurkan:

```
sistem, spesies, kondisi, E_Hartree, H_Hartree, G_Hartree
cis_trans_2butena, cis, gas, ...
cis_trans_2butena, trans, gas, ...
dimer_air, monomer, gas, ...
dimer_air, dimer, gas, ...
```

Python kemudian menghitung:

```
 $\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$ 
 $\Delta H = \Sigma H_{\text{produk}} - \Sigma H_{\text{reaktan}}$ 
 $\Delta G = \Sigma G_{\text{produk}} - \Sigma G_{\text{reaktan}}$ 
```

Lalu mengonversi:

Hartree $\rightarrow$ kJ/mol

Dan menghasilkan:

```
tabel energi
tabel  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ 
diagram energi reaksi
grafik perbandingan fase gas dan pelarut
CSV hasil analisis
```

Dengan integrasi ini, software komputasi dan Python membentuk satu workflow lengkap.

21. Kesalahan Umum dalam Penggunaan Software

Beberapa kesalahan umum dalam Praktikum 7 adalah:

Kesalahan	Dampak
Menggunakan metode berbeda untuk reaktan dan produk	ΔE tidak valid
Mengambil energi dari struktur belum teroptimasi	Energi tidak mewakili minimum
Mengabaikan frekuensi imajiner	Struktur tidak valid tetap dianalisis
Salah menentukan muatan	Energi spesies salah
Salah menentukan multiplicity	Keadaan elektronik salah
Menggunakan model pelarut untuk produk tetapi tidak untuk reaktan	Perbandingan tidak konsisten
Tidak mencatat basis set	Hasil tidak reproduibel
Mencampur satuan Hartree dan kJ/mol	Perhitungan salah
Menyalin angka energi dari bagian output yang salah	ΔE , ΔH , ΔG keliru
Menganggap ΔE sama dengan ΔG	Kesalahan termodinamika

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari karena dapat mengubah kesimpulan praktikum. Dalam analisis energi reaksi, ketelitian prosedur sangat menentukan kualitas hasil.

22. Etika dan Reprodusibilitas Penggunaan Software

Penggunaan software dalam Praktikum 7 harus memperhatikan etika dan reprodusibilitas. Software komersial seperti Gaussian harus digunakan sesuai lisensi resmi. Software terbuka atau bebas digunakan juga harus dihormati ketentuan penggunaannya. Mahasiswa tidak boleh menggunakan output orang lain tanpa memahami proses perhitungan.

Reprodusibilitas menuntut agar semua file disimpan:

```
struktur awal
input perhitungan
output optimasi
output frekuensi
data energi
kode Python
CSV hasil analisis
grafik
laporan
```

Struktur folder yang dianjurkan:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika/
├── struktur_awal/
├── input_komputasi/
├── output_komputasi/
├── data/
├── kode/
├── output_praktikum_07/
└── laporan/
```

File harus diberi nama jelas agar hubungan antara sistem, spesies, fase, dan output dapat ditelusuri.

Contoh nama file:

```
cis_2butena_gas.out
trans_2butena_gas.out
nh3_gas.out
nh4_pelarut.out
dimer_air_gas.out
asam_asetat_dimer_pelarut.out
```

Penamaan yang baik memudahkan validasi dan penilaian.

23. Implikasi Pedagogis Penggunaan Software

Penggunaan software dalam Praktikum 7 memiliki implikasi pedagogis penting. Mahasiswa belajar bahwa analisis energi reaksi bukan hanya soal memasukkan struktur ke software. Mereka harus memahami konsep energi, termodinamika, koreksi termal, model pelarut, dan pengolahan data.

Kemampuan yang dilatih meliputi:

1. Membaca output energi.
2. Membedakan energi elektronik, entalpi, dan Gibbs.
3. Menilai validitas struktur melalui frekuensi.
4. Menjaga konsistensi metode.
5. Mengelola data banyak spesies.
6. Mengonversi satuan.
7. Membuat diagram energi.
8. Menafsirkan efek pelarut.
9. Menulis analisis kritis.

Dengan demikian, software tidak hanya menjadi alat hitung, tetapi menjadi media pembentukan literasi komputasi dan termodinamika.

24. Transisi ke Sistem Reaksi Model

Subbab 10.3 telah membahas software yang digunakan dalam Praktikum 7, yaitu ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, dan Python. Setiap software memiliki peran berbeda dalam workflow praktikum. ChemCompute membantu akses berbasis web. GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, dan PySCF digunakan untuk menghitung energi, optimasi, frekuensi, termokimia, dan model pelarut sesuai kemampuan masing-masing. Python digunakan untuk mengolah data energi menjadi ΔE , ΔH , ΔG , diagram energi, grafik perbandingan fase gas dan pelarut, serta file CSV.

Subbab berikutnya akan membahas sistem reaksi model, yaitu isomerisasi cis-trans 2-butena, protonasi amonia, hidrasi formaldehida, dimer air, konformer etanol, serta asam asetat monomer dan dimer. Sistem-sistem tersebut dipilih agar mahasiswa dapat mempelajari berbagai bentuk persoalan energi: isomerisasi, protonasi, hidrasi, ikatan hidrogen, konformasi, dimerisasi, dan efek pelarut.

10.4 Sistem Reaksi Model

Sistem reaksi model dalam Praktikum 7 dipilih untuk memperlihatkan cara kimia komputasi digunakan dalam menghitung **energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, dan efek pelarut** pada beberapa jenis persoalan kimia yang berbeda. Pemilihan sistem tidak dilakukan secara acak. Setiap

sistem dirancang untuk mengajarkan konsep tertentu: kestabilan isomer, protonasi, hidrasi, ikatan hidrogen, konformasi, dimerisasi, entropi, dan stabilisasi oleh pelarut.

Sistem reaksi model dalam Praktikum 7 adalah:

1. **Isomerisasi cis-trans 2-butena.**
2. **Protonasi amonia.**
3. **Hidrasi formaldehida.**
4. **Dimer air.**
5. **Konformer etanol.**
6. **Asam asetat monomer dan dimer.**

Keenam sistem ini mewakili beberapa pola penting dalam kimia. Isomerisasi cis-trans 2-butena mewakili perbandingan kestabilan isomer. Protonasi amonia mewakili pembentukan spesies bermuatan dan pengaruh pelarut polar. Hidrasi formaldehida mewakili reaksi adisi pada gugus karbonil. Dimer air mewakili interaksi ikatan hidrogen sederhana. Konformer etanol mewakili kestabilan relatif struktur yang berbeda akibat rotasi ikatan tunggal. Asam asetat monomer dan dimer mewakili asosiasi molekul melalui ikatan hidrogen ganda dan peran entropi dalam dimerisasi.

Dengan sistem-sistem tersebut, mahasiswa tidak hanya menghitung energi, tetapi belajar membaca energi sebagai informasi kimia. Perhitungan ΔE , ΔH , dan ΔG harus dihubungkan dengan struktur, ikatan, polaritas, entropi, dan pelarut. Praktikum ini menuntut mahasiswa menyadari bahwa satu angka energi tidak cukup untuk menjelaskan keseluruhan fenomena. Energi elektronik, entalpi, energi bebas Gibbs, serta efek pelarut harus dipahami sebagai lapisan-lapisan informasi yang saling melengkapi.

Secara umum, sistem reaksi model Praktikum 7 dapat dipetakan sebagai berikut:

No.	Sistem Model	Jenis Persoalan	Konsep Utama
1	Isomerisasi cis-trans 2-butena	Isomerisasi	Kestabilan relatif, efek sterik
2	Protonasi amonia	Reaksi asam-basa	Spesies bermuatan, pelarut polar
3	Hidrasi formaldehida	Adisi nukleofilik	Karbonil, hidrasi, efek pelarut
4	Dimer air	Asosiasi molekul	Ikatan hidrogen, entalpi vs entropi
5	Konformer etanol	Konformasi	Rotasi ikatan tunggal, energi relatif
6	Asam asetat monomer-dimer	Dimerisasi	Ikatan hidrogen ganda, penalti entropi

Tabel ini menunjukkan bahwa setiap sistem memiliki fungsi pedagogis. Mahasiswa tidak hanya diminta menghitung semua sistem dengan cara yang sama, tetapi juga memahami mengapa sistem tersebut dipilih dan konsep apa yang hendak diuji.

1. Prinsip Pemilihan Sistem Reaksi Model

Sistem reaksi model dalam Praktikum 7 dipilih berdasarkan beberapa prinsip.

Pertama, sistem harus **cukup sederhana secara komputasi**. Molekul seperti 2-butena, amonia, formaldehida, air, etanol, dan asam asetat relatif kecil sehingga dapat dihitung dengan metode dasar seperti HF, DFT, atau metode lain yang tersedia pada ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF.

Kedua, sistem harus **mewakili fenomena kimia yang nyata**. Isomerisasi, protonasi, hidrasi, dimerisasi, dan perubahan konformer adalah fenomena yang umum dalam kimia organik, kimia fisik, kimia larutan, dan biokimia.

Ketiga, sistem harus **memungkinkan perhitungan selisih energi**. Praktikum 7 berfokus pada perbandingan energi antara reaktan dan produk, isomer, konformer, atau monomer dan dimer. Oleh karena itu, setiap sistem harus memiliki pasangan keadaan yang dapat dibandingkan.

Keempat, sistem harus **menunjukkan perbedaan antara ΔE , ΔH , dan ΔG** . Misalnya, dimerisasi dapat menguntungkan secara entalpi tetapi kurang menguntungkan secara energi bebas Gibbs karena penalti entropi. Hal ini membantu mahasiswa memahami bahwa energi elektronik tidak identik dengan spontanitas.

Kelima, sistem harus **memungkinkan pembahasan efek pelarut**. Protonasi amonia, hidrasi formaldehida, dimer air, dan dimer asam asetat sangat relevan untuk melihat pengaruh pelarut terhadap spesies polar, bermuatan, atau berikatan hidrogen.

Keenam, sistem harus **berkaitan dengan konsep yang sudah dipelajari sebelumnya**. Praktikum tentang geometri, orbital, momen dipol, frekuensi vibrasi, dan spektrum IR menjadi dasar untuk memahami energi reaksi dan termodinamika pada Bab 10.

Dengan prinsip ini, sistem reaksi model tidak hanya berfungsi sebagai latihan hitung, tetapi sebagai sarana untuk memahami konsep kimia yang lebih luas.

2. Ringkasan Sistem Reaksi Model

Ringkasan sistem model dapat disusun sebagai berikut:

Sistem	Reaktan/Keadaan Awal	Produk/Keadaan Akhir	Besaran Utama	Fokus Analisis
Isomerisasi cis-trans 2-butena	cis-2-butena	trans-2-butena	ΔE , ΔH , ΔG	Isomer lebih stabil
Protonasi amonia	$\text{NH}_3 + \text{H}^+$	NH_4^+	ΔE , ΔG , efek pelarut	Stabilisasi ion

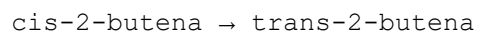
Hidrasi formaldehida	$\text{H}_2\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$\text{CH}_2(\text{OH})_2$	$\Delta E, \Delta H, \Delta G$	Adisi air pada $\text{C}=\text{O}$
Dimer air	$2 \text{H}_2\text{O}$	$(\text{H}_2\text{O})_2$	Energi dimerisasi	Ikatan hidrogen dan entropi
Konformer etanol	Konformer 1	Konformer 2	Energi relatif	Rotasi ikatan dan stabilitas
Asam asetat monomer-dimer	$2 \text{CH}_3\text{COOH}$	$(\text{CH}_3\text{COOH})_2$	Energi dimerisasi	Ikatan hidrogen ganda

Tabel ini menjadi pedoman awal. Dalam pelaksanaan praktikum, mahasiswa harus menghitung energi setiap spesies dengan metode yang sama dan kemudian menghitung selisih energi sesuai stoikiometri.

3. Isomerisasi cis-trans 2-butena

Sistem pertama adalah **isomerisasi cis-trans 2-butena**. 2-butena memiliki dua isomer geometris utama, yaitu cis-2-butena dan trans-2-butena. Keduanya memiliki rumus molekul sama, yaitu C_4H_8 , tetapi berbeda susunan ruang di sekitar ikatan rangkap $\text{C}=\text{C}$.

Reaksi konseptualnya dapat ditulis:



Energi isomerisasi dapat dihitung dengan:

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

Demikian pula:

$$\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$$

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

Jika ΔE , ΔH , atau ΔG bernilai negatif, maka trans-2-butena lebih stabil daripada cis-2-butena berdasarkan besaran tersebut. Secara umum, trans-2-butena cenderung lebih stabil karena gugus metil pada posisi trans lebih berjauhan sehingga tolakan sterik lebih kecil. Pada cis-2-butena, dua gugus metil berada pada sisi yang sama dari ikatan rangkap sehingga interaksi sterik lebih besar.

Secara konseptual:

cis-2-butena
 → gugus metil berdekatan
 → tolakan sterik lebih besar
 → energi relatif lebih tinggi

trans-2-butena
 → gugus metil berseberangan
 → tolakan sterik lebih kecil
 → energi relatif lebih rendah

Sistem ini sangat baik untuk memperkenalkan konsep **kestabilan relatif isomer**. Mahasiswa dapat melihat bahwa molekul dengan rumus sama dapat memiliki energi berbeda karena susunan atomnya berbeda.

4. Catatan Kritis pada Isomerisasi cis-trans 2-butena

Isomerisasi cis-trans 2-butena perlu dipahami sebagai perbandingan termodinamika, bukan simulasi mekanisme lengkap. Rotasi bebas di sekitar ikatan rangkap C=C tidak terjadi seperti rotasi ikatan tunggal karena ikatan π harus diputus atau dilemahkan. Oleh karena itu, perubahan cis menjadi trans dalam kenyataan melibatkan hambatan energi dan mekanisme tertentu, bukan sekadar rotasi sederhana.

Dalam Praktikum 7, mahasiswa tidak diminta menghitung jalur reaksi atau keadaan transisi isomerisasi cis-trans. Fokusnya adalah membandingkan energi dua isomer yang sudah dioptimasi. Dengan kata lain, praktikum ini menjawab pertanyaan:

isomer mana yang lebih stabil secara termodinamika?

bukan pertanyaan:

berapa energi aktivasi perubahan cis menjadi trans?

Perbedaan ini penting. Kestabilan termodinamika dan laju reaksi adalah dua hal berbeda. Trans-2-butena dapat lebih stabil daripada cis-2-butena, tetapi perubahan cis menjadi trans tetap memerlukan mekanisme dan energi aktivasi.

Data yang harus dicatat untuk sistem ini:

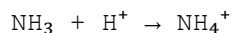
Spesies	Muatan	Multiplicity	Kondisi	Energi yang Dicatat
cis-2-butena	0	1	gas/pelarut	E, H, G
trans-2-butena	0	1	gas/pelarut	E, H, G

Contoh analisis laporan:

Energi trans-2-butena lebih rendah daripada cis-2-butena pada tingkat teori yang digunakan. Hal ini menunjukkan bahwa trans-2-butena lebih stabil secara termodinamika. Perbedaan ini dapat dijelaskan oleh tolakan sterik yang lebih kecil antara gugus metil pada isomer trans dibandingkan isomer cis.

5. Protonasi Amonia

Sistem kedua adalah **protonasi amonia**. Amonia, NH_3 , memiliki pasangan elektron bebas pada atom N sehingga dapat menerima proton membentuk ion amonium, NH_4^+ . Reaksi konseptualnya:



Sistem ini digunakan untuk membahas reaksi asam-basa, pembentukan spesies bermuatan, dan efek pelarut. NH_3 adalah molekul netral polar, sedangkan NH_4^+ adalah ion bermuatan positif. Karena itu, perbandingan fase gas dan pelarut dapat sangat menarik.

Secara konseptual:



→ molekul netral dengan pasangan elektron bebas



→ akseptor pasangan elektron



→ ion bermuatan positif

pelarut polar

→ menstabilkan NH_4^+

Energi reaksi dapat ditulis:

$$\Delta E = E_{\text{NH}_4^+} - (E_{\text{NH}_3} + E_{\text{H}^+})$$

Demikian pula:

$$\Delta H = H_{\text{NH}_4^+} - (H_{\text{NH}_3} + H_{\text{H}^+})$$

$$\Delta G = G_{\text{NH}_4^+} - (G_{\text{NH}_3} + G_{\text{H}^+})$$

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa proton bebas adalah spesies ideal. Dalam larutan nyata, proton tidak berada sebagai partikel bebas sederhana, tetapi tersolvasi dalam bentuk seperti H_3O^+ atau struktur solvasi lain. Oleh karena itu, sistem protonasi amonia dalam praktikum dasar harus dipahami sebagai model konseptual untuk mempelajari stabilisasi ion, bukan sebagai representasi lengkap kimia proton dalam larutan.

6. Catatan Kritis pada Protonasi Amonia

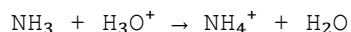
Protonasi amonia sangat berguna secara pedagogis, tetapi harus dianalisis dengan hati-hati. Ada beberapa catatan penting.

Pertama, NH_4^+ adalah spesies bermuatan. Spesies bermuatan sangat sensitif terhadap model pelarut. Dalam pelarut polar, NH_4^+ dapat distabilkan lebih kuat daripada NH_3 . Karena itu, ΔG protonasi dalam pelarut dapat berbeda signifikan dari fase gas.

Kedua, proton bebas H^+ tidak memiliki elektron. Dalam beberapa paket komputasi, energi elektronik proton dapat diperlakukan secara khusus atau menggunakan konvensi tertentu. Jika mahasiswa tidak yakin, instruktur dapat menyederhanakan sistem dengan memberikan data energi proton atau menggunakan reaksi model alternatif seperti transfer proton dari H_3O^+ ke NH_3 .

Ketiga, jika reaksi dihitung dalam pelarut, semua spesies harus dihitung dalam model pelarut yang sama. Tidak boleh menghitung NH_3 dalam fase gas dan NH_4^+ dalam pelarut lalu membandingkannya langsung tanpa kerangka termodinamika yang jelas.

Keempat, jika ingin membahas protonasi secara lebih realistis, reaksi dapat dimodelkan sebagai:



Namun, dalam daftar sistem Praktikum 7, bentuk sederhana protonasi amonia tetap digunakan sebagai model awal.

Data yang perlu dicatat:

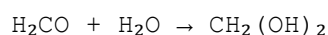
Spesies	Muatan	Multiplicity	Catatan
NH_3	0	1	Molekul netral polar
H^+	+1	1	Spesies ideal, perlu konvensi
NH_4^+	+1	1	Ion amonium

Contoh analisis laporan:

Protonasi amonia menghasilkan NH_4^+ yang bermuatan positif. Dalam model pelarut polar, NH_4^+ dapat mengalami stabilisasi lebih besar dibanding NH_3 karena interaksi elektrostatis dengan medium pelarut. Oleh karena itu, perbandingan fase gas dan pelarut penting untuk memahami peran pelarut dalam reaksi protonasi.

7. Hidrasi Formaldehida

Sistem ketiga adalah **hidrasi formaldehida**. Formaldehida memiliki gugus karbonil $\text{C}=\text{O}$ yang dapat mengalami adisi air membentuk metanadiol atau geminal diol, $\text{CH}_2(\text{OH})_2$. Reaksi konseptualnya:



Sistem ini digunakan untuk memperkenalkan hubungan antara kimia karbonil, reaksi adisi, efek pelarut, dan energi bebas. Formaldehida adalah molekul karbonil sederhana. Atom C pada gugus

C=O bersifat elektrofilik karena oksigen menarik kerapatan elektron. Air dapat bertindak sebagai nukleofil, meskipun dalam reaksi nyata proses ini sering dipengaruhi oleh katalisis asam atau basa.

Secara konseptual:

formaldehida

→ memiliki C=O polar

air

→ dapat berperan sebagai nukleofil lemah

produk hidrasi

→ CH₂(OH)₂

→ memiliki dua gugus O-H

Energi reaksi:

$$\Delta E = E_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (E_{\text{H}_2\text{CO}} + E_{\text{H}_2\text{O}})$$

Demikian pula:

$$\Delta H = H_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (H_{\text{H}_2\text{CO}} + H_{\text{H}_2\text{O}})$$

$$\Delta G = G_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (G_{\text{H}_2\text{CO}} + G_{\text{H}_2\text{O}})$$

Sistem ini penting karena menunjukkan bahwa pembentukan ikatan baru tidak selalu otomatis menguntungkan secara energi bebas. Reaksi hidrasi melibatkan perubahan struktur, pembentukan ikatan C–O dan O–H, serta perubahan jumlah partikel dari dua molekul menjadi satu molekul. Perubahan jumlah partikel ini dapat memengaruhi entropi.

8. Catatan Kritis pada Hidrasi Formaldehida

Hidrasi formaldehida perlu dianalisis dengan beberapa catatan kritis.

Pertama, reaksi yang ditulis sebagai $\text{H}_2\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_2(\text{OH})_2$ adalah reaksi bersih. Mekanisme nyata dapat melibatkan tahapan transfer proton dan katalisis. Praktikum 7 tidak menghitung mekanisme lengkap, tetapi menghitung perbandingan energi reaktan dan produk.

Kedua, karena reaksi menggabungkan dua molekul menjadi satu produk, kontribusi entropi dapat penting. ΔE atau ΔH mungkin menunjukkan kecenderungan tertentu, tetapi ΔG dapat berbeda karena perubahan entropi.

Ketiga, pelarut dapat memengaruhi kestabilan formaldehida, air, dan produk hidrasi. Produk yang memiliki dua gugus O–H dapat berinteraksi kuat dengan pelarut polar. Karena itu, perbandingan fase gas dan pelarut penting.

Keempat, dalam model pelarut kontinu, efek dielektrik dapat ditangkap, tetapi ikatan hidrogen eksplisit antara solut dan pelarut tidak selalu tergambarkan. Untuk hidrasi formaldehida, interaksi air spesifik dapat penting dalam mekanisme nyata.

Data yang harus dicatat:

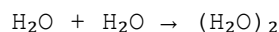
Spesies	Muatan	Multiplicity	Fokus
H ₂ CO	0	1	Karbonil reaktan
H ₂ O	0	1	Reaktan air
CH ₂ (OH) ₂	0	1	Produk hidrasi

Contoh analisis laporan:

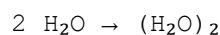
Hidrasi formaldehida membandingkan energi formaldehida dan air sebagai reaktan dengan metanadiol sebagai produk. Reaksi ini melibatkan perubahan gugus karbonil menjadi geminal diol. Nilai ΔG penting karena reaksi mengubah jumlah partikel dan dapat dipengaruhi oleh kontribusi entropi serta efek pelarut.

9. Dimer Air

Sistem keempat adalah **dimer air**. Dimer air terbentuk ketika dua molekul H₂O berinteraksi melalui ikatan hidrogen. Reaksi konseptualnya:



atau:



Energi dimerisasi:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Demikian pula:

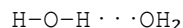
$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Dimer air adalah sistem sederhana tetapi sangat penting. Ia memperkenalkan konsep **ikatan hidrogen** sebagai interaksi antarmolekul. Ikatan hidrogen tidak sekuat ikatan kovalen, tetapi sangat penting dalam kimia air, biokimia, struktur protein, DNA, pelarut, dan banyak sistem material.

Dalam dimer air, satu molekul air bertindak sebagai donor hidrogen dan molekul lain bertindak sebagai akseptor melalui pasangan elektron bebas oksigen.

Secara konseptual:



- satu H berinteraksi dengan O molekul lain
- terbentuk ikatan hidrogen

Jika ΔE negatif, pembentukan dimer menguntungkan secara energi elektronik. Namun, ΔG dapat kurang menguntungkan karena dua molekul bebas menjadi satu kompleks, sehingga entropi translasi menurun.

10. Catatan Kritis pada Dimer Air

Dimer air sangat baik untuk memperlihatkan perbedaan antara ΔE , ΔH , dan ΔG .

Secara entalpi atau energi elektronik, pembentukan dimer dapat menguntungkan karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, dari sisi entropi, dua molekul bebas berubah menjadi satu kompleks. Jumlah keadaan translasi dan rotasi bebas berkurang, sehingga entropi menurun. Akibatnya, ΔG dapat menjadi kurang negatif atau bahkan positif tergantung kondisi dan model.

Secara konseptual:

pembentukan ikatan hidrogen

- menurunkan energi
- ΔE atau ΔH dapat negatif

dua molekul menjadi satu kompleks

- entropi turun
- $-T\Delta S$ menjadi positif
- ΔG kurang menguntungkan

Sistem ini sangat penting untuk menjawab pertanyaan diskusi tentang mengapa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG .

Data yang perlu dicatat:

Spesies	Muatan	Multiplicity	Fokus
H ₂ O monomer	0	1	Energi monomer
(H ₂ O) ₂ dimer	0	1	Energi kompleks ikatan hidrogen

Contoh analisis laporan:

Dimer air menunjukkan bahwa pembentukan ikatan hidrogen dapat menurunkan energi elektronik, tetapi energi bebas Gibbs harus mempertimbangkan perubahan entropi. Karena dua molekul air bergabung menjadi satu dimer, entropi translasi berkurang, sehingga ΔG dapat berbeda signifikan dari ΔE atau ΔH .

Mahasiswa juga harus memperhatikan geometri awal dimer. Jika dua molekul air ditempatkan terlalu jauh, optimasi dapat menghasilkan interaksi lemah atau tidak terbentuk dimer. Jika terlalu dekat, struktur dapat tidak realistis. Geometri awal harus cukup masuk akal untuk membentuk ikatan hidrogen.

11. Konformer Etanol

Sistem kelima adalah **konformer etanol**. Etanol memiliki rumus C_2H_6O dan struktur CH_3CH_2OH . Karena memiliki ikatan tunggal C–C dan C–O, etanol dapat memiliki beberapa konformasi akibat rotasi internal. Konformer adalah bentuk struktur yang berbeda karena rotasi ikatan tunggal, tetapi tidak memerlukan pemutusan ikatan kovalen.

Dalam Praktikum 7, mahasiswa dapat membandingkan dua atau lebih konformer etanol, misalnya konformer yang berbeda pada sudut dihedral C–C–O–H atau orientasi gugus O–H terhadap rangka karbon.

Perbandingan energi konformer dapat ditulis:

konformer A $\rightarrow$ konformer B

Energi relatif:

$$\Delta E = E_B - E_A$$

Jika ΔE positif, konformer B lebih tinggi energi daripada konformer A. Jika ΔE negatif, konformer B lebih rendah energi daripada konformer A.

Konformer etanol penting karena selisih energi konformer biasanya kecil. Oleh karena itu, praktikum ini melatih mahasiswa membaca angka energi dengan teliti, mengonversi Hartree ke kJ/mol, dan menyadari bahwa perbedaan kecil dapat bermakna secara kimia.

12. Catatan Kritis pada Konformer Etanol

Konformer etanol memperlihatkan bahwa satu rumus molekul dapat memiliki beberapa struktur minimum. Setiap konformer dapat memiliki energi yang sedikit berbeda karena perbedaan interaksi intramolekul, orientasi gugus O–H, dan tolakan sterik.

Dalam analisis konformer, mahasiswa harus memperhatikan beberapa hal.

Pertama, setiap konformer harus dioptimasi. Struktur awal yang berbeda dapat runtuh ke konformer yang sama setelah optimasi. Oleh karena itu, mahasiswa harus memeriksa geometri akhir, bukan hanya geometri awal.

Kedua, perbedaan energi konformer sering kecil. Jika selisih energi hanya beberapa kJ/mol, metode komputasi, basis set, dan koreksi termal dapat memengaruhi urutan kestabilan.

Ketiga, suhu memengaruhi populasi konformer. Konformer yang sedikit lebih tinggi energi tetap dapat hadir dalam jumlah tertentu pada suhu kamar.

Keempat, pelarut dapat mengubah kestabilan relatif konformer jika salah satu konformer lebih polar atau lebih mampu berinteraksi dengan pelarut.

Data yang perlu dicatat:

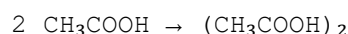
Spesies	Muatan	Multiplicity	Fokus
Etanol konformer A	0	1	Energi relatif
Etanol konformer B	0	1	Energi relatif
Etanol konformer C	0	1	Jika digunakan

Contoh analisis laporan:

Konformer etanol menunjukkan bahwa struktur berbeda yang berasal dari rotasi ikatan tunggal dapat memiliki energi relatif berbeda. Konformer dengan energi paling rendah dianggap paling stabil pada tingkat teori yang digunakan. Karena perbedaan energi konformer biasanya kecil, konsistensi metode dan ketelitian konversi satuan sangat penting.

13. Asam Asetat Monomer dan Dimer

Sistem keenam adalah **asam asetat monomer dan dimer**. Asam asetat, CH_3COOH , dapat membentuk dimer melalui dua ikatan hidrogen antara gugus karboksilat. Reaksi konseptualnya:



Energi dimerisasi:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Demikian pula:

$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Asam asetat dimer adalah model yang sangat baik untuk mempelajari interaksi antarmolekul yang lebih kuat dan lebih terarah daripada dimer air sederhana. Dimer asam asetat sering memiliki dua ikatan hidrogen yang membentuk struktur siklik. Interaksi ini dapat sangat menstabilkan dimer secara entalpi.

Secara konseptual:

dua monomer asam asetat
 → membentuk dua ikatan hidrogen
 → dimer siklik
 → energi elektronik/entalpi dapat turun

Namun, seperti dimer air, dimerisasi asam asetat juga mengalami penalti entropi karena dua molekul bebas menjadi satu kompleks. Oleh karena itu, ΔG dapat berbeda dari ΔE atau ΔH .

14. Catatan Kritis pada Dimer Asam Asetat

Dimer asam asetat penting untuk membahas kompetisi antara **entalpi ikatan hidrogen** dan **entropi asosiasi**. Pembentukan dua ikatan hidrogen dapat sangat menguntungkan secara entalpi, tetapi proses asosiasi mengurangi jumlah partikel bebas.

Secara konseptual:

dua ikatan hidrogen
 → stabilisasi entalpi besar

dua monomer menjadi satu dimer
 → entropi translasi turun

hasil akhir
 → ΔG bergantung pada keseimbangan entalpi dan entropi

Efek pelarut juga penting. Dalam pelarut nonpolar, dimer asam asetat dapat lebih stabil karena ikatan hidrogen antar asam asetat tidak banyak bersaing dengan pelarut. Dalam pelarut polar atau donor/akseptor ikatan hidrogen, monomer dapat distabilkan oleh pelarut sehingga kecenderungan dimerisasi dapat berubah.

Model pelarut kontinu dapat menangkap efek dielektrik umum, tetapi tidak selalu menggambarkan ikatan hidrogen spesifik antara pelarut dan asam asetat. Jika pelarut eksplisit dimasukkan, hasil dapat berbeda.

Data yang perlu dicatat:

Spesies	Muatan	Multiplicity	Fokus
CH ₃ COOH monomer	0	1	Energi monomer
(CH ₃ COOH) ₂ dimer	0	1	Energi dimer ikatan hidrogen

Contoh analisis laporan:

Dimer asam asetat terbentuk melalui dua ikatan hidrogen antara dua monomer. Pembentukan dimer dapat menguntungkan secara entalpi karena ikatan hidrogen menstabilkan kompleks. Namun, ΔG dimerisasi harus mempertimbangkan penalti entropi karena dua molekul bebas menjadi satu dimer.

15. Perbandingan Sistem Isomer, Konformer, dan Reaksi

Sistem dalam Praktikum 7 dapat dikelompokkan menjadi tiga kategori besar.

Kategori pertama adalah **perbandingan isomer atau konformer**, yaitu cis-trans 2-butena dan konformer etanol. Pada sistem ini, reaktan dan produk memiliki rumus molekul sama. Fokusnya adalah kestabilan relatif.

Kategori kedua adalah **reaksi kimia yang mengubah komposisi atau konektivitas**, yaitu protonasi amonia dan hidrasi formaldehida. Pada sistem ini, terjadi perubahan ikatan atau perubahan muatan.

Kategori ketiga adalah **asosiasi molekul**, yaitu dimer air dan dimer asam asetat. Pada sistem ini, beberapa molekul bergabung membentuk kompleks melalui interaksi antarmolekul.

Tabel perbandingan:

Kategori	Sistem	Fokus Utama
Isomer/konformer	cis-trans 2-butena, konformer etanol	Energi relatif struktur
Reaksi kimia	protonasi amonia, hidrasi formaldehida	ΔE , ΔH , ΔG reaksi
Asosiasi	dimer air, dimer asam asetat	Ikatan hidrogen dan entropi

Perbedaan kategori ini penting karena cara menafsirkan energinya tidak sama. Pada isomer dan konformer, jumlah molekul tidak berubah, sehingga kontribusi entropi translasi biasanya tidak sebesar pada asosiasi. Pada dimerisasi, dua molekul menjadi satu kompleks, sehingga entropi sangat penting. Pada protonasi, muatan dan pelarut menjadi faktor utama.

16. Muatan dan Multiplicity Sistem Model

Setiap spesies harus memiliki muatan dan multiplicity yang benar. Kesalahan muatan atau multiplicity dapat menyebabkan energi salah.

Tabel umum:

Spesies	Muatan	Multiplicity
cis-2-butena	0	1
trans-2-butena	0	1
NH ₃	0	1
H ⁺	+1	1
NH ₄ ⁺	+1	1
H ₂ CO	0	1
H ₂ O	0	1
CH ₂ (OH) ₂	0	1

(H ₂ O) ₂	0	1
Etanol konformer	0	1
CH ₃ COOH	0	1
(CH ₃ COOH) ₂	0	1

Sebagian besar sistem adalah netral singlet. Pengecualian penting adalah H⁺ dan NH₄⁺ yang bermuatan positif. Mahasiswa harus memastikan bahwa input muatan sesuai dengan spesies yang dihitung.

Kesalahan contoh:

NH₄⁺ dihitung dengan muatan 0
 → jumlah elektron salah
 → energi tidak valid

Pernyataan laporan yang baik:

Semua spesies netral dihitung dengan muatan 0 dan multiplicity 1, sedangkan spesies bermuatan seperti NH₄⁺ dihitung dengan muatan +1 dan multiplicity 1.

17. Hubungan Sistem Model dengan ΔE , ΔH , dan ΔG

Setiap sistem model harus dihitung dalam tiga tingkat interpretasi energi: ΔE , ΔH , dan ΔG .

ΔE menunjukkan perbedaan energi elektronik. ΔH menunjukkan perbedaan entalpi setelah koreksi termal. ΔG menunjukkan energi bebas Gibbs yang memasukkan kontribusi entropi.

Format umum:

$$\begin{aligned}\Delta E &= \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}} \\ \Delta H &= \Sigma H_{\text{produk}} - \Sigma H_{\text{reaktan}} \\ \Delta G &= \Sigma G_{\text{produk}} - \Sigma G_{\text{reaktan}}\end{aligned}$$

Untuk dimerisasi:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Untuk isomerisasi:

$$\Delta E = E_{\text{isomer_akhir}} - E_{\text{isomer_awal}}$$

Untuk protonasi:

$$\Delta E = E_{\text{NH}_4^+} - (E_{\text{NH}_3} + E_{\text{H}^+})$$

Untuk hidrasi:

$$\Delta E = E_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (E_{\text{H}_2\text{CO}} + E_{\text{H}_2\text{O}})$$

Mahasiswa harus menulis rumus sesuai sistem. Kesalahan umum adalah lupa mengalikan energi monomer dengan 2 pada reaksi dimerisasi. Jika menghitung dimer air tetapi menggunakan:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - E_{\text{monomer}}$$

maka hasilnya salah. Rumus yang benar:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

18. Peran Fase Gas dan Pelarut pada Sistem Model

Tidak semua sistem sama sensitif terhadap pelarut. Sistem yang melibatkan muatan dan polaritas tinggi akan lebih dipengaruhi pelarut dibanding sistem nonpolar.

Tabel sensitivitas pelarut:

Sistem	Sensitivitas terhadap Pelarut	Alasan
cis-trans 2-butena	Relatif kecil	Molekul netral nonpolar/lemah polar
protonasi amonia	Besar	Melibatkan NH_4^+ bermuatan
hidrasi formaldehida	Sedang hingga besar	Melibatkan karbonil dan gugus O–H
dimer air	Sedang	Ikatan hidrogen dan polaritas
konformer etanol	Sedang	Perbedaan polaritas konformer dapat berpengaruh
asam asetat monomer-dimer	Besar bergantung pelarut	Ikatan hidrogen dan gugus polar

Pelarut polar dapat menstabilkan spesies bermuatan atau polar. Namun, untuk dimerisasi, pelarut dapat memiliki dua efek berbeda. Di satu sisi, pelarut dapat menstabilkan dimer. Di sisi lain, pelarut juga dapat menstabilkan monomer dan bersaing dengan ikatan hidrogen dimer. Karena itu, efek pelarut harus dianalisis secara hati-hati.

19. Format Data Awal untuk Semua Sistem Model

Sebelum menjalankan analisis Python, mahasiswa harus menyusun data awal dari output komputasi. Format data awal yang dianjurkan:

Sistem	Spesies	Peran	Koefisien	Kondisi	E	H	G	Satuan
cis-trans 2-butena	cis	reaktan	1	gas	...	...	...	Hartree
cis-trans 2-butena	trans	produk	1	gas	...	...	...	Hartree
dimer air	H ₂ O	reaktan	2	gas	...	...	...	Hartree

dimer air	(H ₂ O) ₂	produk	1	gas	...	...	...	Hartree

Kolom **koefisien** sangat penting agar Python dapat menghitung energi reaksi dengan benar. Untuk dimerisasi, koefisien monomer adalah 2. Untuk hidrasi formaldehida, koefisien H₂CO dan H₂O masing-masing 1. Untuk protonasi amonia, koefisien NH₃ dan H⁺ masing-masing 1.

Dengan format seperti ini, analisis menjadi lebih rapi dan dapat diperluas.

20. Kesalahan Umum pada Sistem Reaksi Model

Beberapa kesalahan umum dalam Praktikum 7 adalah:

Kesalahan	Dampak
Menghitung reaktan dan produk dengan metode berbeda	Energi reaksi tidak valid
Lupa mengalikan energi monomer pada dimerisasi	ΔE , ΔH , ΔG salah
Salah menentukan muatan NH ₄ ⁺	Energi protonasi salah
Menganggap H ⁺ sebagai spesies biasa tanpa catatan	Analisis protonasi kurang kritis
Tidak memeriksa frekuensi imajiner	Struktur tidak valid tetap dianalisis
Menganggap dimerisasi selalu spontan karena ΔE negatif	Mengabaikan entropi
Menganggap pelarut selalu menstabilkan produk	Pelarut dapat menstabilkan reaktan atau produk
Membandingkan fase gas dan pelarut tanpa konsistensi	Kesimpulan efek pelarut keliru
Tidak menyebut koefisien stoikiometri	Perhitungan selisih energi salah
Tidak mengonversi Hartree ke kJ/mol	Interpretasi kimia sulit

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari karena dapat mengubah kesimpulan utama praktikum.

21. Implikasi Keilmuan Pemilihan Sistem Model

Pemilihan sistem model dalam Praktikum 7 memiliki implikasi keilmuan yang kuat.

Pertama, mahasiswa belajar bahwa kestabilan molekul dapat dibandingkan secara kuantitatif. Isomer dan konformer dapat diurutkan berdasarkan energi relatif.

Kedua, mahasiswa belajar bahwa reaksi kimia tidak hanya ditentukan oleh pembentukan ikatan, tetapi juga oleh entropi dan lingkungan. Dimer air dan dimer asam asetat menunjukkan bahwa ikatan hidrogen dapat menguntungkan secara entalpi, tetapi asosiasi molekul dapat mengalami penalti entropi.

Ketiga, mahasiswa belajar bahwa pelarut memiliki peran aktif. Protonasi amonia menunjukkan bahwa spesies bermuatan dapat sangat distabilkan oleh pelarut polar.

Keempat, mahasiswa belajar bahwa kimia organik dan kimia fisik dapat dipadukan melalui komputasi. Hidrasi formaldehida menghubungkan reaktivitas karbonil dengan termodinamika. Konformer etanol menghubungkan rotasi ikatan dengan energi relatif. Asam asetat dimer menghubungkan ikatan hidrogen dengan energi bebas.

Kelima, mahasiswa belajar bahwa setiap model memiliki keterbatasan. Proton bebas, model pelarut kontinu, dan perhitungan gas ideal harus ditafsirkan sebagai pendekatan, bukan gambaran lengkap semua realitas kimia.

22. Implikasi Pedagogis Sistem Reaksi Model

Secara pedagogis, sistem model dalam Praktikum 7 melatih mahasiswa untuk berpikir bertingkat.

Pada tingkat pertama, mahasiswa belajar menghitung energi setiap spesies.

Pada tingkat kedua, mahasiswa belajar menghitung selisih energi berdasarkan stoikiometri.

Pada tingkat ketiga, mahasiswa belajar membedakan ΔE , ΔH , dan ΔG .

Pada tingkat keempat, mahasiswa belajar membaca efek entropi.

Pada tingkat kelima, mahasiswa belajar membandingkan fase gas dan pelarut.

Pada tingkat keenam, mahasiswa belajar menyusun analisis kritis yang menghubungkan data dan teori.

Alur pedagogisnya:

```
struktur
→ energi
→ selisih energi
→ termodinamika
→ efek pelarut
→ analisis kimia
```

Dengan sistem model yang beragam, mahasiswa tidak hanya menguasai satu jenis perhitungan, tetapi memahami bagaimana konsep energi digunakan dalam berbagai konteks kimia.

23. Transisi ke Jalur ChemCompute

Subbab 10.4 telah membahas sistem reaksi model yang digunakan dalam Praktikum 7, yaitu isomerisasi cis-trans 2-butena, protonasi amonia, hidrasi formaldehida, dimer air, konformer etanol, serta asam asetat monomer dan dimer. Setiap sistem dipilih untuk memperlihatkan konsep yang berbeda: kestabilan isomer, pembentukan ion, hidrasi karbonil, ikatan hidrogen, energi konformer, dimerisasi, entropi, dan efek pelarut.

Subbab berikutnya akan membahas jalur ChemCompute. Pada subbab 10.5, mahasiswa akan menghitung energi reaktan dan produk dengan metode yang sama, mengambil energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs dari output, lalu menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG . Dengan memahami sistem model terlebih dahulu, mahasiswa akan lebih siap menjalankan perhitungan secara konsisten dan menafsirkan hasilnya secara ilmiah.

10.5 Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute dalam Praktikum 7 digunakan untuk menghitung **energi reaktan dan produk dengan metode yang sama**, kemudian menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG berdasarkan output yang diperoleh. Jalur ini menjadi tahap praktis yang menghubungkan dasar teori pada subbab 10.2 dengan sistem reaksi model pada subbab 10.4. Melalui ChemCompute, mahasiswa dapat melakukan optimasi geometri, perhitungan energi, perhitungan frekuensi, dan pengambilan data termokimia tanpa harus sejak awal menginstal paket komputasi secara lokal.

Namun, ChemCompute harus dipahami secara tepat. ChemCompute adalah **platform akses komputasi berbasis web**, bukan nama metode kimia kuantum. Metode perhitungan tetap harus disebutkan secara jelas, misalnya HF, DFT, basis set tertentu, model pelarut tertentu, serta paket komputasi yang digunakan di balik platform tersebut. Oleh karena itu, laporan yang hanya menulis “perhitungan dilakukan dengan ChemCompute” belum memadai. Laporan harus menyebutkan **metode, basis set, muatan, multiplicity, jenis job, status optimasi, model pelarut, dan data energi yang digunakan**.

Tujuan utama jalur ChemCompute dalam Praktikum 7 adalah:

1. Menghitung energi elektronik reaktan dan produk.
2. Mengambil koreksi termokimia dari output.
3. Menghitung ΔE .
4. Menghitung ΔH .
5. Menghitung ΔG .
6. Membandingkan hasil fase gas dan pelarut jika model pelarut tersedia.
7. Memastikan semua perhitungan dilakukan dengan level teori yang konsisten.
8. Menyimpan output sebagai bukti reproduktibilitas.

Alur umum jalur ChemCompute dapat ditulis sebagai berikut:

```
pilih sistem reaksi
→ siapkan struktur reaktan dan produk
```

- tetapkan muatan dan multiplicity
- pilih metode dan basis set yang sama
- optimasi geometri
- perhitungan frekuensi
- ambil E, H, dan G dari output
- hitung ΔE , ΔH , dan ΔG
- bandingkan fase gas dan pelarut
- susun tabel dan analisis

Jalur ini harus dilaksanakan secara disiplin karena perhitungan energi reaksi sangat sensitif terhadap kesalahan kecil. Jika reaktan dan produk dihitung dengan metode berbeda, jika muatan salah, jika struktur belum teroptimasi, atau jika frekuensi imajiner diabaikan, maka nilai ΔE , ΔH , dan ΔG tidak dapat dipercaya. Dalam kimia komputasi, kualitas kesimpulan sangat bergantung pada kualitas prosedur.

1. Kedudukan Jalur ChemCompute dalam Praktikum 7

Jalur ChemCompute berfungsi sebagai jalur awal untuk memperoleh data energi reaksi. Mahasiswa menggunakan ChemCompute untuk menghitung setiap spesies dalam sistem model, misalnya cis-2-butena dan trans-2-butena, NH_3 dan NH_4^+ , formaldehida dan produk hidrasi, monomer dan dimer air, beberapa konformer etanol, serta monomer dan dimer asam asetat.

Dalam Praktikum 7, ChemCompute memiliki kedudukan sebagai:

Fungsi	Keterangan
Akses komputasi	Menyediakan jalur berbasis web untuk menjalankan perhitungan
Sumber data energi	Menghasilkan energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs jika tersedia
Sarana validasi	Membantu mengecek optimasi dan frekuensi imajiner
Sumber output	Menyediakan file output yang dapat disimpan dan diperiksa ulang
Penghubung ke Python	Data energi dari ChemCompute menjadi input jalur Python mandiri

Kedudukan ini penting karena ChemCompute bukan tujuan akhir. Output ChemCompute harus diolah lebih lanjut. Nilai energi yang diperoleh harus dihitung selisihnya, dikonversi satuannya, dibandingkan, dan ditafsirkan secara termodinamika.

Dengan kata lain:

ChemCompute

- menghasilkan data energi

Python dan laporan

- mengolah, membandingkan, dan menafsirkan data energi

Mahasiswa harus memahami bahwa angka energi dari output belum langsung menjadi kesimpulan. Angka tersebut harus ditempatkan dalam konteks reaksi, stoikiometri, metode, dan kondisi perhitungan.

2. Prinsip Konsistensi Metode

Prinsip paling penting dalam jalur ChemCompute adalah **konsistensi metode**. Semua spesies dalam satu perbandingan energi harus dihitung dengan metode dan basis set yang sama. Jika reaktan dihitung dengan metode berbeda dari produk, maka selisih energi tidak lagi mencerminkan perbedaan kimia, tetapi tercampur dengan perbedaan metode komputasi.

Prinsip konsistensi meliputi:

1. Metode sama.
2. Basis set sama.
3. Model pelarut sama untuk kondisi yang dibandingkan.
4. Muatan sesuai spesies.
5. Multiplicity sesuai keadaan elektronik.
6. Jenis job sebanding.
7. Koreksi termokimia diambil dari perhitungan yang setara.
8. Satuan energi diseragamkan.

Contoh yang benar:

```
cis-2-butena
→ B3LYP/6-31G(d), gas, Opt Freq

trans-2-butena
→ B3LYP/6-31G(d), gas, Opt Freq

 $\Delta G = G_{trans} - G_{cis}$ 
```

Contoh yang salah:

```
cis-2-butena
→ HF/STO-3G

trans-2-butena
→ B3LYP/6-31G(d)

 $\Delta G$  dibandingkan langsung
→ tidak valid
```

Dalam literatur kimia komputasi, seperti pembahasan Jensen, Cramer, Leach, Lewars, dan Levine, konsistensi level teori merupakan syarat dasar untuk membandingkan energi relatif. Kesalahan dalam konsistensi dapat menghasilkan kesimpulan yang tampak numerik tetapi tidak bermakna secara ilmiah.

3. Menyiapkan Struktur Reaktan dan Produk

Tahap pertama adalah menyiapkan struktur reaktan dan produk. Struktur dapat dibuat langsung di antarmuka ChemCompute jika tersedia editor molekul, atau dibuat dengan software seperti Avogadro, GaussView, Molden, atau editor molekul lain. Struktur awal harus wajar secara kimia karena struktur yang buruk dapat menyebabkan optimasi gagal atau menghasilkan minimum yang tidak diinginkan.

Struktur yang harus disiapkan sesuai sistem model adalah:

Sistem	Struktur yang Disiapkan
Isomerisasi cis-trans 2-butena	cis-2-butena dan trans-2-butena
Protonasi amonia	NH_3 , H^+ , dan NH_4^+
Hidrasi formaldehida	H_2CO , H_2O , dan $\text{CH}_2(\text{OH})_2$
Dimer air	H_2O monomer dan $(\text{H}_2\text{O})_2$ dimer
Konformer etanol	Dua atau lebih konformer etanol
Asam asetat monomer-dimer	CH_3COOH monomer dan $(\text{CH}_3\text{COOH})_2$ dimer

Untuk sistem dimer, geometri awal sangat penting. Jika dua molekul terlalu jauh, interaksi antarmolekul mungkin tidak terbentuk. Jika terlalu dekat, struktur awal tidak realistis dan optimasi dapat bermasalah. Pada dimer air dan dimer asam asetat, posisi donor dan akseptor ikatan hidrogen harus disusun masuk akal.

Contoh struktur awal dimer air secara konseptual:



satu molekul air bertindak sebagai donor H
molekul lain bertindak sebagai akseptor melalui atom O

Untuk dimer asam asetat, struktur awal sebaiknya membentuk dimer siklik dengan dua ikatan hidrogen antara dua gugus karboksilat.

4. Menentukan Muatan dan Multiplicity

Setiap spesies harus diberi muatan dan multiplicity yang benar. Kesalahan muatan atau multiplicity akan mengubah jumlah elektron dan keadaan elektronik, sehingga energi yang diperoleh tidak valid.

Tabel muatan dan multiplicity:

Spesies	Muatan	Multiplicity
cis-2-butena	0	1
trans-2-butena	0	1
NH ₃	0	1
H ⁺	+1	1
NH ₄ ⁺	+1	1
H ₂ CO	0	1
H ₂ O	0	1
CH ₂ (OH) ₂	0	1
(H ₂ O) ₂	0	1
Etanol konformer	0	1
CH ₃ COOH	0	1
(CH ₃ COOH) ₂	0	1

Sebagian besar spesies dalam Praktikum 7 adalah netral singlet. Spesies bermuatan utama adalah H⁺ dan NH₄⁺. Untuk protonasi amonia, mahasiswa harus berhati-hati karena H⁺ adalah model ideal. Dalam larutan nyata, proton biasanya tersolvasi, bukan berdiri sebagai partikel bebas sederhana. Karena itu, protonasi amonia dalam praktikum ini harus dipahami sebagai model konseptual untuk melihat efek stabilisasi spesies bermuatan.

Contoh kesalahan:

NH₄⁺ dimasukkan dengan muatan 0
 → jumlah elektron salah
 → energi salah
 → ΔE, ΔH, dan ΔG tidak valid

Pernyataan laporan yang baik:

Semua spesies netral dihitung dengan muatan 0 dan multiplicity 1. Spesies bermuatan seperti NH₄⁺ dihitung dengan muatan +1 dan multiplicity 1. Seluruh spesies dalam satu sistem dihitung dengan metode dan basis set yang sama.

5. Memilih Metode dan Basis Set

Setelah struktur, muatan, dan multiplicity ditentukan, mahasiswa memilih metode dan basis set. Dalam praktikum dasar, metode yang digunakan dapat berupa HF, DFT, atau metode lain yang tersedia. Untuk analisis energi reaksi yang lebih baik, DFT sering digunakan karena memberikan keseimbangan antara biaya komputasi dan kualitas hasil. Namun, pilihan metode harus mengikuti ketersediaan platform, arahan instruktur, dan kemampuan komputasi.

Contoh level teori yang dapat digunakan dalam praktikum:

HF/STO-3G
 HF/6-31G
 B3LYP/6-31G(d)

B3LYP/6-31G*

Yang paling penting bukan sekadar memilih metode yang paling tinggi, tetapi menjaga konsistensi. Semua spesies dalam satu sistem harus dihitung dengan level teori yang sama.

Format pencatatan metode:

Sistem	Spesies	Metode	Basis Set	Kondisi
cis-trans 2-butena	cis	B3LYP	6-31G(d)	gas
cis-trans 2-butena	trans	B3LYP	6-31G(d)	gas
dimer air	H ₂ O	B3LYP	6-31G(d)	gas
dimer air	(H ₂ O) ₂	B3LYP	6-31G(d)	gas

Jika model pelarut digunakan, kolom kondisi harus mencantumkan jenis pelarut atau model pelarut.

6. Memilih Jenis Job: Opt, Freq, atau Opt Freq

Untuk memperoleh data termodinamika yang lengkap, mahasiswa harus menjalankan optimasi geometri dan perhitungan frekuensi. Optimasi geometri diperlukan untuk memperoleh struktur minimum. Perhitungan frekuensi diperlukan untuk memperoleh ZPE, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs, dan validasi frekuensi imajiner.

Jenis job yang dianjurkan:

Opt Freq

atau jika platform memisahkan tahap:

1. Opt
2. Freq pada geometri hasil optimasi

Alur yang benar:

```
struktur awal
→ optimasi geometri
→ struktur minimum
→ perhitungan frekuensi
→ E, ZPE, H, S, G
```

Alur yang harus dihindari:

```
struktur awal belum dioptimasi
→ langsung mengambil energi
→ dibandingkan sebagai energi reaksi
```

Energi dari struktur awal yang belum dioptimasi tidak layak digunakan sebagai energi reaksi karena struktur tersebut belum tentu berada pada minimum lokal.

7. Memeriksa Status Optimasi

Setelah job selesai, mahasiswa harus memeriksa status optimasi. Jika optimasi tidak konvergen, energi tidak boleh langsung digunakan. Output yang tidak konvergen dapat menghasilkan geometri yang belum stabil dan data termokimia yang tidak dapat dipercaya.

Hal yang harus diperiksa:

1. Apakah optimasi selesai normal?
2. Apakah gaya sudah konvergen?
3. Apakah perpindahan geometri sudah memenuhi kriteria?
4. Apakah struktur akhir masuk akal?
5. Apakah perhitungan frekuensi berhasil?
6. Apakah ada frekuensi imajiner?

Dalam laporan, mahasiswa dapat menulis:

Optimasi geometri untuk seluruh spesies selesai konvergen. Perhitungan frekuensi tidak menunjukkan frekuensi imajiner untuk struktur minimum, sehingga data termokimia digunakan untuk menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG .

Jika optimasi gagal:

Optimasi belum konvergen sehingga energi tidak digunakan untuk analisis. Struktur perlu diperbaiki atau optimasi diulang.

Sikap ini penting karena praktikum komputasi harus berbasis data valid.

8. Memeriksa Frekuensi Imajiner

Frekuensi imajiner harus diperiksa setelah perhitungan frekuensi. Untuk reaktan, produk, isomer, konformer, monomer, dan dimer yang dimaksudkan sebagai minimum, tidak boleh ada frekuensi imajiner. Jika ada frekuensi imajiner, struktur belum dapat dianggap sebagai minimum lokal.

Prinsip validasi:

tidak ada frekuensi imajiner
→ struktur valid sebagai minimum lokal

ada frekuensi imajiner
→ struktur perlu diperiksa ulang

Pada Praktikum 7, mahasiswa tidak sedang mencari keadaan transisi. Karena itu, frekuensi imajiner bukan hasil yang diharapkan. Satu frekuensi imajiner dapat bermakna dalam pencarian keadaan transisi, tetapi bukan untuk reaktan atau produk stabil.

Format tabel validasi:

Sistem	Spesies	Frekuensi Imajiner	Status
cis-trans 2-butena	cis	Tidak ada	Valid
cis-trans 2-butena	trans	Tidak ada	Valid
dimer air	H ₂ O	Tidak ada	Valid
dimer air	(H ₂ O) ₂	Tidak ada	Valid

Jika ditemukan frekuensi imajiner:

Output menunjukkan frekuensi imajiner. Struktur belum digunakan untuk menghitung ΔG dan perlu dioptimasi ulang.

9. Mengambil Energi Elektronik dari Output

Energi elektronik biasanya merupakan data utama pertama yang diambil dari output. Energi ini sering dinyatakan dalam Hartree. Dalam output, namanya dapat berbeda tergantung paket komputasi, misalnya:

SCF Energy
Total Energy
Electronic Energy
Final Energy
DFT Energy

Mahasiswa harus memastikan bahwa energi yang diambil adalah energi akhir dari struktur teroptimasi, bukan energi dari iterasi awal atau energi sementara. Kesalahan mengambil energi dari bagian output yang salah merupakan kesalahan umum dalam praktikum komputasi.

Format pencatatan:

Sistem	Spesies	E elektronik (Hartree)
cis-trans 2-butena	cis	...
cis-trans 2-butena	trans	...
dimer air	H ₂ O	...
dimer air	(H ₂ O) ₂	...

Energi elektronik digunakan untuk menghitung ΔE :

$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

Jika satuan awal Hartree, selisih energi kemudian dikonversi ke kJ/mol:

$$\Delta E_{\text{kJ/mol}} = \Delta E_{\text{Hartree}} \times 2625,5$$

10. Mengambil Entalpi dari Output

Entalpi diperoleh dari output termokimia setelah perhitungan frekuensi. Nama bagian output dapat berbeda-beda, tetapi biasanya memuat istilah enthalpy atau thermal correction to enthalpy.

Mahasiswa harus membedakan:

energi elektronik

→ E

energi elektronik + koreksi termal entalpi

→ H

Jika output memberikan langsung nilai entalpi total, mahasiswa dapat menggunakannya. Jika output hanya memberikan koreksi termal entalpi, mahasiswa perlu memahami bagaimana nilai total entalpi dihitung sesuai format output software.

Secara umum:

$$H_{\text{total}} = E_{\text{elektronik}} + \text{koreksi entalpi}$$

Untuk reaksi:

$$\Delta H = \sum H_{\text{produk}} - \sum H_{\text{reaktan}}$$

Data yang dicatat:

Sistem	Spesies	H (Hartree)
hidrasi formaldehida	H ₂ CO	...
hidrasi formaldehida	H ₂ O	...
hidrasi formaldehida	CH ₂ (OH) ₂	...

Jika nilai entalpi tidak tersedia dalam output, mahasiswa harus mencatat keterbatasan tersebut dan tidak membuat ΔH seolah-olah tersedia.

11. Mengambil Energi Bebas Gibbs dari Output

Energi bebas Gibbs adalah data utama untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu. Output frekuensi biasanya dapat memberikan nilai Gibbs free energy atau koreksi termal menuju Gibbs.

Secara umum:

$$G = H - TS$$

Dalam output software, nilai ini sering dihitung berdasarkan model gas ideal, pendekatan osilator harmonik, dan suhu tertentu, biasanya sekitar 298,15 K jika tidak diubah.

Untuk reaksi:

$$\Delta G = \Sigma G_{\text{produk}} - \Sigma G_{\text{reaktan}}$$

Mahasiswa harus mencatat suhu jika tersedia. Jika output menggunakan suhu 298,15 K, maka laporan dapat menulis:

Nilai energi bebas Gibbs diambil dari output perhitungan frekuensi pada suhu 298,15 K.

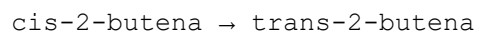
Energi bebas Gibbs tidak boleh disamakan dengan energi elektronik. ΔG mencakup kontribusi entalpi dan entropi, sedangkan ΔE hanya menggambarkan selisih energi elektronik. Perbedaan ini menjadi inti analisis Praktikum 7.

12. Menghitung ΔE Berdasarkan Output ChemCompute

Setelah energi elektronik diperoleh, mahasiswa menghitung ΔE . Rumus umum:

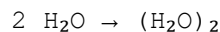
$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

Contoh isomerisasi cis-trans 2-butena:



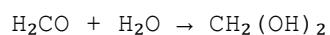
$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

Contoh dimer air:



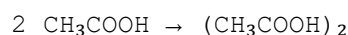
$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Contoh hidrasi formaldehida:



$$\Delta E = E_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (E_{\text{H}_2\text{CO}} + E_{\text{H}_2\text{O}})$$

Contoh dimer asam asetat:



$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Mahasiswa harus memperhatikan koefisien stoikiometri. Kesalahan paling umum pada dimerisasi adalah lupa mengalikan energi monomer dengan 2.

13. Menghitung ΔH Berdasarkan Output ChemCompute

Perhitungan ΔH dilakukan dengan cara yang sama seperti ΔE , tetapi menggunakan nilai entalpi total.

Rumus umum:

$$\Delta H = \Sigma H_{\text{produk}} - \Sigma H_{\text{reaktan}}$$

Contoh dimer air:

$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

Contoh hidrasi formaldehida:

$$\Delta H = H_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (H_{\text{H}_2\text{CO}} + H_{\text{H}_2\text{O}})$$

Interpretasi:

ΔH negatif

→ proses menguntungkan secara entalpi

ΔH positif

→ proses tidak menguntungkan secara entalpi

Namun, ΔH belum mencakup penilaian spontanitas secara lengkap. Untuk itu diperlukan ΔG .

Dalam dimerisasi, ΔH dapat negatif karena terbentuk ikatan hidrogen. Tetapi ΔG dapat kurang negatif atau positif karena adanya penalti entropi.

14. Menghitung ΔG Berdasarkan Output ChemCompute

Perhitungan ΔG dilakukan dengan menggunakan nilai energi bebas Gibbs dari output.

Rumus umum:

$$\Delta G = \Sigma G_{\text{produk}} - \Sigma G_{\text{reaktan}}$$

Contoh dimer asam asetat:

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Contoh isomerisasi cis-trans 2-butena:

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

Interpretasi:

ΔG negatif

→ proses termodinamika menguntungkan pada kondisi yang digunakan

ΔG positif

→ proses termodinamika tidak menguntungkan pada kondisi yang digunakan

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa ΔG dari output komputasi bergantung pada model, suhu, keadaan standar, dan asumsi gas ideal atau model pelarut. Oleh karena itu, nilai ΔG harus dianalisis secara kritis, bukan diterima mutlak.

15. Konversi Hartree ke kJ/mol

Energi dari output sering berada dalam Hartree. Agar mudah ditafsirkan secara kimia, selisih energi dikonversi ke kJ/mol.

Konversi:

$$1 \text{ Hartree} \approx 2625,5 \text{ kJ/mol}$$

Rumus:

$$\Delta E_{\text{kJ/mol}} = \Delta E_{\text{Hartree}} \times 2625,5$$

$$\Delta H_{\text{kJ/mol}} = \Delta H_{\text{Hartree}} \times 2625,5$$

$$\Delta G_{\text{kJ/mol}} = \Delta G_{\text{Hartree}} \times 2625,5$$

Contoh:

$$\Delta G = -0,0040 \text{ Hartree}$$

$$\Delta G = -0,0040 \times 2625,5$$

$$\Delta G = -10,50 \text{ kJ/mol}$$

Mahasiswa harus menghitung selisih dalam Hartree terlebih dahulu, baru mengonversinya. Jangan mengonversi energi absolut secara terpisah jika pembulatan terlalu kasar, karena selisih energi dapat kehilangan ketelitian. Lebih aman menyimpan cukup banyak digit desimal energi sebelum menghitung selisih.

16. Jalur ChemCompute untuk Isomerisasi cis-trans 2-butena

Langkah jalur ChemCompute untuk isomerisasi cis-trans 2-butena:

1. Bangun struktur cis-2-butena.
2. Atur muatan 0 dan multiplicity 1.
3. Pilih metode dan basis set.
4. Jalankan Opt Freq.
5. Simpan E_cis, H_cis, dan G_cis.
6. Bangun struktur trans-2-butena.
7. Gunakan metode dan basis set yang sama.
8. Jalankan Opt Freq.
9. Simpan E_trans, H_trans, dan G_trans.
10. Hitung ΔE , ΔH , dan ΔG .

Rumus:

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

$$\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$$

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

Analisis yang diharapkan:

Jika ΔG bernilai negatif, maka trans-2-butena lebih stabil secara termodinamika daripada cis-2-butena pada tingkat teori yang digunakan. Perbedaan kestabilan dapat dikaitkan dengan tolakan sterik yang lebih kecil pada isomer trans.

17. Jalur ChemCompute untuk Protonasi Amonia

Langkah untuk protonasi amonia:

1. Hitung NH_3 dengan muatan 0 dan multiplicity 1.
2. Hitung H^+ dengan muatan +1 dan multiplicity 1 jika digunakan sebagai model.
3. Hitung NH_4^+ dengan muatan +1 dan multiplicity 1.
4. Gunakan metode dan basis set yang sama.
5. Jika membandingkan pelarut, ulangi semua spesies dengan model pelarut yang sama.
6. Ambil E, H, dan G.
7. Hitung ΔE , ΔH , dan ΔG .

Rumus:

$$\Delta E = E_{\text{NH}_4^+} - (E_{\text{NH}_3} + E_{\text{H}^+})$$

$$\Delta H = H_{\text{NH}_4^+} - (H_{\text{NH}_3} + H_{\text{H}^+})$$

$$\Delta G = G_{\text{NH}_4^+} - (G_{\text{NH}_3} + G_{\text{H}^+})$$

Catatan kritis:

H^+ adalah spesies ideal. Dalam larutan nyata, proton tersolvasi. Oleh karena itu, protonasi amonia dalam praktikum ini digunakan sebagai model konseptual untuk memahami stabilisasi spesies bermuatan oleh pelarut.

Jika model pelarut digunakan, NH_4^+ biasanya mengalami stabilisasi lebih besar daripada NH_3 karena bermuatan positif. Hal ini dapat terlihat dari perbedaan energi fase gas dan pelarut.

18. Jalur ChemCompute untuk Hidrasi Formaldehida

Langkah untuk hidrasi formaldehida:

1. Hitung formaldehida, H_2CO .
2. Hitung air, H_2O .
3. Hitung produk hidrasi, $CH_2(OH)_2$.
4. Gunakan metode dan basis set yang sama.
5. Jalankan Opt Freq untuk semua spesies.
6. Ambil E, H, dan G.
7. Hitung ΔE , ΔH , dan ΔG .

Rumus:

$$\Delta E = E_{CH_2(OH)_2} - (E_{H_2CO} + E_{H_2O})$$

$$\Delta H = H_{CH_2(OH)_2} - (H_{H_2CO} + H_{H_2O})$$

$$\Delta G = G_{CH_2(OH)_2} - (G_{H_2CO} + G_{H_2O})$$

Analisis yang diharapkan:

Hidrasi formaldehida mengubah gugus karbonil menjadi geminal diol. Nilai ΔG penting karena reaksi menggabungkan dua molekul menjadi satu produk dan dapat dipengaruhi oleh perubahan entropi serta efek pelarut.

19. Jalur ChemCompute untuk Dimer Air

Langkah untuk dimer air:

1. Hitung H_2O monomer.
2. Bangun struktur dimer air dengan ikatan hidrogen.
3. Hitung $(H_2O)_2$ dimer.
4. Gunakan metode dan basis set yang sama.
5. Jalankan Opt Freq untuk monomer dan dimer.
6. Ambil E, H, dan G.
7. Hitung energi dimerisasi.

Rumus:

$$\Delta E = E_{dimer} - 2E_{monomer}$$

$$\Delta H = H_{dimer} - 2H_{monomer}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Analisis:

Jika ΔE atau ΔH negatif, pembentukan dimer menguntungkan secara energi atau entalpi karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, ΔG dapat kurang menguntungkan karena dua molekul air bebas bergabung menjadi satu kompleks sehingga entropi translasi menurun.

Sistem ini sangat baik untuk menunjukkan bahwa pembentukan interaksi antarmolekul tidak otomatis berarti proses selalu spontan dalam arti Gibbs.

20. Jalur ChemCompute untuk Konformer Etanol

Langkah untuk konformer etanol:

1. Bangun dua atau lebih konformer etanol.
2. Atur semua sebagai muatan 0 dan multiplicity 1.
3. Gunakan metode dan basis set yang sama.
4. Optimasi setiap konformer.
5. Periksa apakah konformer akhir tetap berbeda.
6. Jalankan frekuensi.
7. Ambil E, H, dan G.
8. Hitung energi relatif.

Rumus perbandingan dua konformer:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{\text{konformer}_B} - E_{\text{konformer}_A} \\ \Delta H &= H_{\text{konformer}_B} - H_{\text{konformer}_A} \\ \Delta G &= G_{\text{konformer}_B} - G_{\text{konformer}_A}\end{aligned}$$

Jika lebih dari dua konformer, energi relatif dapat dihitung terhadap konformer paling rendah:

$$\Delta G_{\text{relatif}} = G_{\text{konformer}_i} - G_{\text{konformer}_{\text{terendah}}}$$

Catatan penting:

Struktur awal yang berbeda dapat mengarah ke struktur akhir yang sama setelah optimasi. Oleh karena itu, geometri akhir harus diperiksa.

Konformer etanol melatih mahasiswa membaca perbedaan energi kecil secara teliti.

21. Jalur ChemCompute untuk Asam Asetat Monomer dan Dimer

Langkah untuk asam asetat monomer-dimer:

1. Bangun struktur CH_3COOH monomer.
2. Bangun struktur dimer asam asetat dengan dua ikatan hidrogen.
3. Gunakan metode dan basis set yang sama.
4. Jalankan Opt Freq untuk monomer dan dimer.
5. Ambil E, H, dan G.
6. Hitung energi dimerisasi.

Rumus:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Analisis yang diharapkan:

Dimer asam asetat dapat stabil secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen. Namun, pembentukan dimer mengurangi jumlah partikel bebas sehingga kontribusi entropi dapat membuat ΔG kurang menguntungkan dibanding ΔH .

Jika model pelarut digunakan, mahasiswa harus membahas apakah pelarut menstabilkan monomer atau dimer secara lebih besar.

22. Perhitungan Fase Gas dan Pelarut

Jika ChemCompute menyediakan pilihan model pelarut, mahasiswa dapat membandingkan fase gas dan pelarut. Prinsipnya, semua spesies dihitung dua kali:

1. Fase gas
2. Model pelarut

Contoh untuk protonasi amonia:

NH_3 gas

H^+ gas

NH_4^+ gas

NH_3 pelarut

H^+ pelarut

NH_4^+ pelarut

Kemudian dihitung:

ΔG_{gas}

$\Delta G_{\text{pelarut}}$

Perbedaan:

$$\text{pengaruh pelarut} = \Delta G_{\text{pelarut}} - \Delta G_{\text{gas}}$$

Jika nilai berubah signifikan, berarti pelarut memengaruhi kestabilan relatif reaktan dan produk.

Mahasiswa harus mencatat:

Data Pelarut	Keterangan
Model pelarut	PCM, CPCM, SMD, COSMO, atau lainnya
Nama pelarut	Air, etanol, aseton, atau lainnya
Kondisi	Fase gas atau pelarut
Software/paket	Sesuai output ChemCompute
Catatan	Model kontinu atau eksplisit

Model pelarut kontinu berguna, tetapi memiliki keterbatasan. Ia tidak selalu menggambarkan ikatan hidrogen spesifik antara solut dan pelarut.

23. Format Tabel Data dari ChemCompute

Data dari ChemCompute sebaiknya disusun dalam tabel sebelum diolah dengan Python.

Format tabel data mentah:

Sistem	Spesies	Peran	Koefisien	Kondisi	E (Hartree)	H (Hartree)	G (Hartree)
cis-trans 2-butena	cis	reaktan	1	gas	...	...	...
cis-trans 2-butena	trans	produk	1	gas	...	...	...
dimer air	H ₂ O	reaktan	2	gas	...	...	...
dimer air	(H ₂ O) ₂	produk	1	gas	...	...	...

Kolom **koefisien** sangat penting untuk menghitung dimerisasi dan reaksi dengan lebih dari satu reaktan.

Tabel hasil perhitungan:

Sistem	Kondisi	ΔE (kJ/mol)	ΔH (kJ/mol)	ΔG (kJ/mol)	Interpretasi
cis-trans 2-butena	gas	...	...	...	trans/cis lebih stabil
dimer air	gas	...	...	...	dimerisasi menguntungkan/tidak
protonasi amonia	pelarut	...	...	...	pelarut menstabilkan ion

Tabel ini menjadi dasar laporan dan jalur Python pada subbab 10.6.

24. Menyimpan Output ChemCompute

Setiap perhitungan harus disimpan. Output tidak boleh hanya dilihat di layar lalu ditutup. File output menjadi bukti bahwa perhitungan benar-benar dilakukan dan dapat diperiksa ulang.

Struktur folder yang dianjurkan:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika/
├──
├── struktur_awal/
├── output_chemcompute/
├── data/
├── kode/
├── output_praktikum_07/
└── laporan/
```

Nama file output yang dianjurkan:

```
cis_2butena_gas.log
trans_2butena_gas.log
nh3_gas.log
nh4_gas.log
nh3_pelarut.log
nh4_pelarut.log
formaldehida_gas.log
air_gas.log
metanadiol_gas.log
dimer_air_gas.log
etanol_konformer_A_gas.log
etanol_konformer_B_gas.log
asam_asetat_monomer_gas.log
asam_asetat_dimer_gas.log
```

Penamaan file harus menunjukkan spesies dan kondisi. Jika perhitungan dilakukan dalam pelarut, nama file harus mencantumkan pelarut atau tanda pelarut.

Contoh:

```
nh4_air_pcm.log
asam_asetat_dimer_air_pcm.log
```

Dengan penamaan seperti ini, data mudah ditelusuri.

25. Validasi Akhir Sebelum Menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG

Sebelum menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , mahasiswa harus melakukan validasi akhir.

Daftar periksa:

- [] Semua struktur telah dioptimasi.
- [] Semua optimasi konvergen.
- [] Tidak ada frekuensi imajiner untuk struktur minimum.
- [] Semua spesies dalam satu sistem menggunakan metode yang sama.
- [] Semua spesies dalam satu sistem menggunakan basis set yang sama.
- [] Muatan dan multiplicity benar.
- [] Model pelarut konsisten.
- [] E, H, dan G diambil dari bagian output yang benar.
- [] Koefisien stoikiometri benar.
- [] Satuan energi diketahui.
- [] Output telah disimpan.

Jika salah satu syarat tidak terpenuhi, hasil tidak boleh langsung dianalisis.

26. Kesalahan Umum pada Jalur ChemCompute

Beberapa kesalahan umum dalam jalur ChemCompute adalah:

Kesalahan	Dampak
Menganggap ChemCompute sebagai metode	Laporan metodologis tidak tepat
Tidak mencatat metode dan basis set	Hasil tidak reproduibel
Reaktan dan produk dihitung dengan metode berbeda	Selisih energi tidak valid
Struktur belum dioptimasi	Energi tidak mewakili minimum
Frekuensi imajiner diabaikan	Struktur tidak valid tetap dianalisis
Salah muatan NH_4^+	Energi protonasi salah
Lupa koefisien 2 pada dimerisasi	ΔE , ΔH , dan ΔG salah
Mengambil energi dari bagian output yang salah	Hasil keliru
Tidak membedakan E, H, dan G	Analisis termodinamika salah
Mencampur fase gas dan pelarut tanpa konsistensi	Efek pelarut tidak valid
Tidak menyimpan output	Hasil tidak dapat diverifikasi

Kesalahan-kesalahan ini harus dijadikan perhatian utama karena Praktikum 7 sangat bergantung pada ketelitian data.

27. Analisis Kritis terhadap Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute sangat membantu pembelajaran karena memudahkan akses. Namun, kemudahan ini tidak boleh membuat mahasiswa menjadi pengguna pasif. Mahasiswa tetap harus memahami apa yang dihitung dan bagaimana hasilnya ditafsirkan.

Ada beberapa keterbatasan jalur ChemCompute.

Pertama, pilihan metode dan basis set mungkin terbatas. Mahasiswa harus menggunakan opsi yang tersedia dan menyebutkannya secara jelas.

Kedua, fitur model pelarut mungkin tidak selalu tersedia atau tidak sama untuk semua paket. Jika model pelarut tidak tersedia, analisis fase gas tetap dapat dilakukan, tetapi pembahasan efek pelarut harus dibatasi.

Ketiga, output web kadang menampilkan ringkasan, tetapi mahasiswa tetap perlu membaca output lengkap. Ringkasan saja belum cukup untuk memastikan status optimasi, frekuensi imajiner, dan data termokimia.

Keempat, model termokimia dari perhitungan frekuensi biasanya menggunakan pendekatan gas ideal dan osilator harmonik. Untuk reaksi asosiasi seperti dimer air dan dimer asam asetat, kontribusi entropi harus ditafsirkan hati-hati.

Kelima, model pelarut kontinu tidak selalu menangkap interaksi spesifik seperti ikatan hidrogen eksplisit.

Pernyataan kritis dalam laporan:

Jalur ChemCompute memudahkan perhitungan energi dan termokimia, tetapi hasil tetap bergantung pada metode, basis set, model pelarut, dan asumsi termokimia. Oleh karena itu, nilai ΔE , ΔH , dan ΔG ditafsirkan sebagai hasil model komputasi, bukan angka mutlak tanpa keterbatasan.

28. Implikasi Pedagogis Jalur ChemCompute

Jalur ChemCompute memiliki implikasi pedagogis yang kuat. Pertama, mahasiswa belajar bahwa perhitungan energi reaksi memerlukan beberapa spesies, bukan satu molekul saja. Kedua, mahasiswa belajar pentingnya konsistensi metode. Ketiga, mahasiswa belajar membaca output termokimia. Keempat, mahasiswa belajar membedakan energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs. Kelima, mahasiswa belajar bahwa pelarut dapat mengubah kestabilan relatif. Keenam, mahasiswa belajar menyusun data energi secara sistematis sebelum diolah dengan Python.

Secara pedagogis, alur berpikir yang dibangun adalah:

```
reaktan dan produk
→ energi masing-masing
→ selisih energi
→ koreksi termal
→ energi bebas Gibbs
→ efek pelarut
→ kesimpulan termodinamika
```

Dengan alur ini, mahasiswa tidak hanya mampu menjalankan perhitungan, tetapi juga memahami struktur logika di balik perhitungan energi reaksi.

29. Transisi ke Jalur Python Mandiri

Subbab 10.5 telah membahas jalur ChemCompute untuk Praktikum 7. Mahasiswa menghitung energi reaktan dan produk dengan metode yang sama, memeriksa status optimasi, memastikan tidak ada frekuensi imajiner, mengambil energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs dari output, lalu menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG berdasarkan stoikiometri reaksi. Subbab ini juga menekankan pentingnya konsistensi metode, basis set, muatan, multiplicity, model pelarut, dan satuan energi.

Subbab berikutnya akan membahas jalur Python mandiri. Pada subbab 10.6, mahasiswa akan menggunakan data energi dari ChemCompute atau software lain sebagai input Python. Kode Python akan menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , mengonversi Hartree ke kJ/mol, membandingkan fase gas dan pelarut, serta membuat diagram energi reaksi. Dengan demikian, data yang diperoleh dari ChemCompute akan diolah menjadi tabel, grafik, dan file CSV hasil analisis yang siap digunakan dalam laporan praktikum.

10.6 Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri dalam Praktikum 7 digunakan untuk mengolah data energi yang diperoleh dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, atau software kimia komputasi lain. Jika jalur ChemCompute pada subbab 10.5 menghasilkan data energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs untuk reaktan dan produk, maka jalur Python mandiri mengubah data tersebut menjadi **tabel energi reaktan-produk, nilai ΔE , ΔH , ΔG , konversi satuan Hartree ke kJ/mol, perbandingan fase gas dan pelarut, serta diagram energi reaksi.**

Python dalam Praktikum 7 bukan pengganti teori termodinamika. Python juga bukan pengganti software kimia kuantum yang menghitung energi elektronik secara langsung. Python digunakan sebagai alat **analisis data**, yaitu untuk menghitung selisih energi, menghindari kesalahan aritmetika, menyimpan hasil dalam CSV, dan membuat visualisasi energi reaksi. Dengan Python, mahasiswa dapat bekerja lebih sistematis, reproduibel, dan transparan.

Kode Python pada Praktikum 7 wajib memuat tujuh komponen utama:

1. **Input energi reaktan dan produk.**
2. **Perhitungan ΔE .**
3. **Perhitungan ΔH .**
4. **Perhitungan ΔG .**
5. **Konversi satuan Hartree ke kJ/mol.**
6. **Perbandingan fase gas dan pelarut.**
7. **Diagram energi reaksi.**

Ketujuh komponen tersebut mencerminkan alur berpikir utama Praktikum 7. Mahasiswa tidak hanya menghitung energi absolut, tetapi menghitung **perubahan energi** berdasarkan stoikiometri reaksi. Mahasiswa juga tidak hanya membandingkan fase gas, tetapi melihat bagaimana model

pelarut dapat mengubah kestabilan relatif reaktan dan produk. Dengan demikian, jalur Python mandiri menjadi penghubung antara output komputasi dan analisis termodinamika dalam laporan.

Secara umum, alur Python mandiri dapat ditulis sebagai berikut:

```
output ChemCompute/software komputasi
→ data energi reaktan dan produk
→ input Python
→ perhitungan  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ , dan  $\Delta G$ 
→ konversi Hartree ke kJ/mol
→ perbandingan fase gas dan pelarut
→ diagram energi reaksi
→ file CSV hasil analisis
→ laporan praktikum
```

Alur ini menekankan bahwa hasil akhir bukan hanya grafik, tetapi sistem data yang dapat diperiksa ulang. Setiap nilai ΔE , ΔH , dan ΔG harus dapat ditelusuri kembali ke energi reaktan dan produk yang digunakan.

1. Kedudukan Python dalam Praktikum 7

Python berperan sebagai alat pengolah dan penyaji data termodinamika. Data energi diperoleh dari software kimia komputasi, sedangkan Python digunakan untuk menghitung selisih dan menyusun output.

Peran Python dalam Praktikum 7 meliputi:

Peran Python	Penjelasan
Pengolah data energi	Membaca energi reaktan dan produk
Kalkulator termodinamika	Menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG
Konverter satuan	Mengubah Hartree menjadi kJ/mol
Pemeriksa stoikiometri	Menggunakan koefisien reaksi dalam perhitungan
Pembanding kondisi	Membandingkan fase gas dan pelarut
Visualisasi	Membuat diagram energi reaksi
Dokumentasi data	Menyimpan hasil dalam CSV

Dalam kimia komputasi, kesalahan sering terjadi bukan hanya pada tahap perhitungan kuantum, tetapi juga pada tahap pengolahan data. Misalnya, mahasiswa dapat lupa mengalikan energi monomer dengan 2 pada reaksi dimerisasi, salah memasukkan tanda negatif, atau mencampur satuan Hartree dan kJ/mol. Python membantu mengurangi kesalahan tersebut jika struktur data disusun dengan benar.

2. Prinsip Dasar Perhitungan Energi Reaksi

Perhitungan energi reaksi selalu mengikuti prinsip:

perubahan energi = energi produk - energi reaktan

Untuk energi elektronik:

$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

Untuk entalpi:

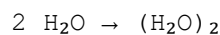
$$\Delta H = \Sigma H_{\text{produk}} - \Sigma H_{\text{reaktan}}$$

Untuk energi bebas Gibbs:

$$\Delta G = \Sigma G_{\text{produk}} - \Sigma G_{\text{reaktan}}$$

Jika koefisien stoikiometri tidak semuanya 1, maka energi setiap spesies harus dikalikan koefisiennya.

Contoh dimer air:



Rumusnya bukan:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - E_{\text{monomer}}$$

melainkan:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Prinsip ini sangat penting. Salah stoikiometri akan menghasilkan nilai ΔE , ΔH , dan ΔG yang salah, meskipun data energi dari software benar.

3. Konvensi Tanda dalam ΔE , ΔH , dan ΔG

Dalam Praktikum 7, konvensi tanda harus digunakan secara konsisten.

Jika:

$$\Delta E < 0$$

maka produk lebih rendah energi elektroniknya daripada reaktan.

Jika:

$$\Delta H < 0$$

maka proses menguntungkan secara entalpi atau bersifat eksotermis dalam kerangka data yang digunakan.

Jika:

$$\Delta G < 0$$

maka proses menguntungkan secara termodinamika pada kondisi yang dihitung.

Sebaliknya:

$$\Delta G > 0$$

menunjukkan bahwa produk kurang menguntungkan secara termodinamika dibanding reaktan pada kondisi tersebut.

Namun, mahasiswa harus memahami bahwa ΔG bukan ukuran laju reaksi. Reaksi dengan ΔG negatif dapat tetap berjalan lambat jika energi aktivasi tinggi. Praktikum 7 membahas termodinamika, bukan kinetika reaksi secara lengkap.

4. Data Input yang Dibutuhkan Python

Data input minimal untuk jalur Python adalah:

1. Nama sistem reaksi.
2. Nama spesies.
3. Peran spesies sebagai reaktan atau produk.
4. Koefisien stoikiometri.
5. Kondisi perhitungan, misalnya gas atau pelarut.
6. Energi elektronik dalam Hartree.
7. Entalpi dalam Hartree.
8. Energi bebas Gibbs dalam Hartree.

Format tabel input yang dianjurkan:

sistem	spesies	peran	koefisien	kondisi	E_Hartree	H_Hartree	G_Hartree
cis_trans_2butena	cis_2butena	reaktan	1	gas	...	...	...
cis_trans_2butena	trans_2butena	produk	1	gas	...	...	...

dimer_air	h2o_monomer	reaktan	2	gas	...	...	...
dimer_air	h2o_dimer	produk	1	gas	...	...	...

Kolom koefisien wajib ada. Kolom ini memastikan Python dapat menghitung reaksi dimerisasi, hidrasi, protonasi, dan isomerisasi dengan benar.

5. Contoh Format CSV Input

Mahasiswa dapat menyimpan data energi dalam file CSV dengan nama, misalnya:

data_energi_reaktan_produk.csv

Contoh struktur CSV:

```
sistem,spesies,peran,koefisien,kondisi,E_Hartree,H_Hartree,G_Hartree
cis_trans_2butena,cis_2butena,reaktan,1,gas,-157.000000,-156.990000,-157.010000
cis_trans_2butena,trans_2butena,produk,1,gas,-157.002000,-156.992000,-157.012500
dimer_air,h2o_monomer,reaktan,2,gas,-76.000000,-75.990000,-76.010000
dimer_air,h2o_dimer,produk,1,gas,-152.005000,-151.985000,-152.000000
etanol_konformer,etanol_A,reaktan,1,gas,-154.000000,-153.990000,-154.010000
etanol_konformer,etanol_B,produk,1,gas,-153.999000,-153.989000,-154.008000
```

Angka pada contoh tersebut adalah **data latihan** untuk menunjukkan format input. Dalam laporan final, mahasiswa harus mengganti semua angka dengan data dari output ChemCompute atau software komputasi yang digunakan.

6. Konversi Hartree ke kJ/mol

Energi dari output kimia kuantum umumnya dinyatakan dalam Hartree. Agar lebih mudah ditafsirkan secara kimia, selisih energi perlu dikonversi ke kJ/mol.

Konversi dasar:

1 Hartree $\approx$ 2625,5 kJ/mol

Rumus:

$$\begin{aligned}\Delta E_{\text{kJ/mol}} &= \Delta E_{\text{Hartree}} \times 2625,5 \\ \Delta H_{\text{kJ/mol}} &= \Delta H_{\text{Hartree}} \times 2625,5 \\ \Delta G_{\text{kJ/mol}} &= \Delta G_{\text{Hartree}} \times 2625,5\end{aligned}$$

Dalam Python, konstanta ini dapat ditulis:

```
HARTREE_TO_KJMOL = 2625.5
```

Konversi sebaiknya dilakukan setelah menghitung selisih energi, bukan setelah membulatkan energi absolut. Hal ini penting karena energi absolut dalam Hartree sering sangat besar, sedangkan selisih energi reaksi relatif kecil. Pembulatan terlalu awal dapat mengubah nilai akhir dalam kJ/mol.

7. Struktur Kode Python yang Dianjurkan

Kode Python Praktikum 7 sebaiknya disusun secara modular. Struktur yang dianjurkan adalah:

1. Impor pustaka.
2. Tentukan konstanta konversi.
3. Baca data energi dari CSV.
4. Validasi kolom input.
5. Hitung energi total reaktan dan produk.
6. Hitung ΔE , ΔH , dan ΔG dalam Hartree.
7. Konversi ΔE , ΔH , dan ΔG ke kJ/mol.
8. Buat tabel hasil.
9. Bandingkan fase gas dan pelarut.
10. Buat diagram energi reaksi.
11. Simpan output CSV.
12. Simpan grafik.

Struktur modular membuat kode mudah dibaca, diperiksa, dan dikembangkan. Kode yang baik harus dapat dijalankan ulang dan menghasilkan output yang sama dari data input yang sama.

8. Contoh Kode Python Jalur Mandiri

Kode berikut merupakan contoh kerangka jalur Python mandiri untuk Praktikum 7. Angka energi dalam contoh adalah **angka latihan**, bukan data hasil penelitian. Dalam praktikum sebenarnya, mahasiswa harus mengganti data tersebut dengan data dari output ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, atau PySCF.

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path

# =====
# PRAKTIKUM 7
# ENERGI REAKSI, TERMODINAMIKA, DAN EFEK PELARUT
# =====
# Fungsi:
# 1. Membaca energi reaktan dan produk
```



```

# 2. Menghitung  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ , dan  $\Delta G$ 
# 3. Mengonversi Hartree ke kJ/mol
# 4. Membandingkan fase gas dan pelarut
# 5. Membuat diagram energi reaksi
# 6. Menyimpan file CSV hasil analisis
# =====

# -----
# 1. Konstanta dan folder
# -----

HARTREE_TO_KJMOL = 2625.5

folder_data = Path("data")
folder_output = Path("output_praktikum_07")

folder_data.mkdir(exist_ok=True)
folder_output.mkdir(exist_ok=True)

file_input = folder_data / "data_energi_reaktan_produk.csv"

# -----
# 2. Membuat file contoh jika file input belum ada
# -----
# Catatan:
# Angka di bawah adalah angka latihan untuk menunjukkan format data.
# Untuk laporan final, ganti dengan energi dari output komputasi.

if not file_input.exists():
    data_contoh = [
        {
            "sistem": "cis_trans_2butena",
            "spesies": "cis_2butena",
            "peran": "reaktan",
            "koefisien": 1,
            "kondisi": "gas",
            "E_Hartree": -157.000000,
            "H_Hartree": -156.990000,
            "G_Hartree": -157.010000,
        },
        {
            "sistem": "cis_trans_2butena",
            "spesies": "trans_2butena",
            "peran": "produk",
            "koefisien": 1,
            "kondisi": "gas",
            "E_Hartree": -157.002000,
            "H_Hartree": -156.992000,
            "G_Hartree": -157.012500,
        },
        {
            "sistem": "dimer_air",
            "spesies": "h2o_monomer",
            "peran": "reaktan",
            "koefisien": 2,
            "kondisi": "gas",
            "E_Hartree": -76.000000,

```

```

    "H_Hartree": -75.990000,
    "G_Hartree": -76.010000,
  },
  {
    "sistem": "dimer_air",
    "spesies": "h2o_dimer",
    "peran": "produk",
    "koefisien": 1,
    "kondisi": "gas",
    "E_Hartree": -152.005000,
    "H_Hartree": -151.985000,
    "G_Hartree": -152.000000,
  },
  {
    "sistem": "protonasi_amonia",
    "spesies": "nh3",
    "peran": "reaktan",
    "koefisien": 1,
    "kondisi": "gas",
    "E_Hartree": -56.000000,
    "H_Hartree": -55.990000,
    "G_Hartree": -56.010000,
  },
  {
    "sistem": "protonasi_amonia",
    "spesies": "h_plus",
    "peran": "reaktan",
    "koefisien": 1,
    "kondisi": "gas",
    "E_Hartree": 0.000000,
    "H_Hartree": 0.000000,
    "G_Hartree": 0.000000,
  },
  {
    "sistem": "protonasi_amonia",
    "spesies": "nh4_plus",
    "peran": "produk",
    "koefisien": 1,
    "kondisi": "gas",
    "E_Hartree": -56.250000,
    "H_Hartree": -56.235000,
    "G_Hartree": -56.220000,
  },
  {
    "sistem": "protonasi_amonia",
    "spesies": "nh3",
    "peran": "reaktan",
    "koefisien": 1,
    "kondisi": "pelarut",
    "E_Hartree": -56.010000,
    "H_Hartree": -56.000000,
    "G_Hartree": -56.020000,
  },
  {
    "sistem": "protonasi_amonia",
    "spesies": "h_plus",
    "peran": "reaktan",

```

```

        "koefisien": 1,
        "kondisi": "pelarut",
        "E_Hartree": -0.100000,
        "H_Hartree": -0.100000,
        "G_Hartree": -0.100000,
    },
    {
        "sistem": "protonasi_amonia",
        "spesies": "nh4_plus",
        "peran": "produk",
        "koefisien": 1,
        "kondisi": "pelarut",
        "E_Hartree": -56.420000,
        "H_Hartree": -56.405000,
        "G_Hartree": -56.395000,
    },
]

df_contoh = pd.DataFrame(data_contoh)
df_contoh.to_csv(file_input, index=False)

print("File contoh dibuat:", file_input)
print("Silakan ganti angka contoh dengan data output komputasi Anda.")

# -----
# 3. Membaca data input
# -----

df = pd.read_csv(file_input)

# -----
# 4. Validasi kolom input
# -----

kolom_wajib = [
    "sistem",
    "spesies",
    "peran",
    "koefisien",
    "kondisi",
    "E_Hartree",
    "H_Hartree",
    "G_Hartree",
]

for kolom in kolom_wajib:
    if kolom not in df.columns:
        raise ValueError(f"Kolom wajib tidak ditemukan: {kolom}")

# Normalisasi teks agar konsisten
df["peran"] = df["peran"].str.lower().str.strip()
df["kondisi"] = df["kondisi"].str.lower().str.strip()
df["sistem"] = df["sistem"].str.lower().str.strip()

# Pastikan hanya ada peran reaktan dan produk
peran_valid = {"reaktan", "produk"}
peran_data = set(df["peran"].unique())

```

```

if not peran_data.issubset(peran_valid):
    raise ValueError("Kolom peran hanya boleh berisi 'reaktan' atau 'produk'.")

# -----
# 5. Menghitung energi total reaktan dan produk
# -----

def hitung_delta_per_grup(grup):
    reaktan = grup[grup["peran"] == "reaktan"]
    produk = grup[grup["peran"] == "produk"]

    if reaktan.empty:
        raise ValueError("Tidak ada reaktan dalam salah satu grup.")
    if produk.empty:
        raise ValueError("Tidak ada produk dalam salah satu grup.")

    E_reaktan = (reaktan["koefisien"] * reaktan["E_Hartree"]).sum()
    H_reaktan = (reaktan["koefisien"] * reaktan["H_Hartree"]).sum()
    G_reaktan = (reaktan["koefisien"] * reaktan["G_Hartree"]).sum()

    E_produk = (produk["koefisien"] * produk["E_Hartree"]).sum()
    H_produk = (produk["koefisien"] * produk["H_Hartree"]).sum()
    G_produk = (produk["koefisien"] * produk["G_Hartree"]).sum()

    delta_E = E_produk - E_reaktan
    delta_H = H_produk - H_reaktan
    delta_G = G_produk - G_reaktan

    return pd.Series({
        "E_reaktan_Hartree": E_reaktan,
        "E_produk_Hartree": E_produk,
        "Delta_E_Hartree": delta_E,
        "Delta_E_kJmol": delta_E * HARTREE_TO_KJMOL,

        "H_reaktan_Hartree": H_reaktan,
        "H_produk_Hartree": H_produk,
        "Delta_H_Hartree": delta_H,
        "Delta_H_kJmol": delta_H * HARTREE_TO_KJMOL,

        "G_reaktan_Hartree": G_reaktan,
        "G_produk_Hartree": G_produk,
        "Delta_G_Hartree": delta_G,
        "Delta_G_kJmol": delta_G * HARTREE_TO_KJMOL,
    })

df_delta = (
    df.groupby(["sistem", "kondisi"], group_keys=False)
    .apply(hitung_delta_per_grup)
    .reset_index()
)

# -----
# 6. Interpretasi sederhana berdasarkan  $\Delta G$ 
# -----

def interpretasi_delta_g(delta_g):

```

```

    if delta_g < -1.0:
        return "Produk lebih menguntungkan secara Gibbs."
    if delta_g > 1.0:
        return "Reaktan lebih menguntungkan secara Gibbs."
    return "Mendekati setimbang pada skala praktikum."

df_delta["interpretasi_Delta_G"] =
df_delta["Delta_G_kJmol"].apply(interpretasi_delta_g)

# -----
# 7. Membandingkan fase gas dan pelarut
# -----

df_perbandingan = None

if set(df_delta["kondisi"].unique()).issuperset({"gas", "pelarut"}):
    pivot = df_delta.pivot_table(
        index="sistem",
        columns="kondisi",
        values=["Delta_E_kJmol", "Delta_H_kJmol", "Delta_G_kJmol"],
        aggfunc="first"
    )

    # Merapikan nama kolom
    pivot.columns = [f"{nilai}_{kondisi}" for nilai, kondisi in pivot.columns]
    df_perbandingan = pivot.reset_index()

    if "Delta_G_kJmol_pelarut" in df_perbandingan.columns and
    "Delta_G_kJmol_gas" in df_perbandingan.columns:
        df_perbandingan["DeltaDelta_G_pelarut_minus_gas_kJmol"] = (
            df_perbandingan["Delta_G_kJmol_pelarut"]
            - df_perbandingan["Delta_G_kJmol_gas"]
        )

# -----
# 8. Menyimpan tabel hasil
# -----

df.to_csv(folder_output / "tabel_energi_reaktan_produk.csv", index=False)
df_delta.to_csv(folder_output / "tabel_delta_E_H_G.csv", index=False)

if df_perbandingan is not None:
    df_perbandingan.to_csv(folder_output /
    "perbandingan_fase_gas_pelarut.csv", index=False)

print("\nTabel ΔE, ΔH, dan ΔG:")
print(df_delta.to_string(index=False))

if df_perbandingan is not None:
    print("\nPerbandingan fase gas dan pelarut:")
    print(df_perbandingan.to_string(index=False))

# -----
# 9. Membuat diagram energi reaksi
# -----

for _, baris in df_delta.iterrows():

```

```

sistem = baris["sistem"]
kondisi = baris["kondisi"]

energi_relatif = [0.0, baris["Delta_G_kJmol"]]
label = ["Reaktan", "Produk"]

plt.figure(figsize=(6, 5))
plt.plot(label, energi_relatif, marker="o")
plt.axhline(0, linewidth=1)
plt.ylabel("Energi Relatif Gibbs (kJ/mol)")
plt.title(f"Diagram Energi Gibbs: {sistem} ({kondisi})")
plt.tight_layout()

nama_file = f"diagram_energi_gibbs_{sistem}_{kondisi}.png"
plt.savefig(folder_output / nama_file, dpi=300)
plt.close()

# -----
# 10. Grafik perbandingan fase gas dan pelarut jika tersedia
# -----

if df_perbandingan is not None and {
    "Delta_G_kJmol_gas",
    "Delta_G_kJmol_pelarut"
}.issubset(df_perbandingan.columns):

    df_plot = df_perbandingan.dropna(
        subset=["Delta_G_kJmol_gas", "Delta_G_kJmol_pelarut"]
    )

    if not df_plot.empty:
        x = range(len(df_plot))

        plt.figure(figsize=(9, 5))
        plt.bar([i - 0.2 for i in x], df_plot["Delta_G_kJmol_gas"], width=0.4,
label="Gas")
        plt.bar([i + 0.2 for i in x], df_plot["Delta_G_kJmol_pelarut"],
width=0.4, label="Pelarut")
        plt.axhline(0, linewidth=1)
        plt.xticks(list(x), df_plot["sistem"], rotation=45, ha="right")
        plt.ylabel("ΔG (kJ/mol)")
        plt.title("Perbandingan ΔG Fase Gas dan Pelarut")
        plt.legend()
        plt.tight_layout()
        plt.savefig(folder_output / "grafik_perbandingan_gas_pelarut.png",
dpi=300)
        plt.close()

print("\nOutput tersimpan di folder:", folder_output)

```

Kode tersebut menghasilkan beberapa output utama:

1. tabel_energi_reaktan_produk.csv
2. tabel_delta_E_H_G.csv
3. perbandingan_fase_gas_pelarut.csv, jika data gas dan pelarut tersedia

4. Diagram energi Gibbs untuk setiap sistem
5. Grafik perbandingan ΔG fase gas dan pelarut
6. Tabel hasil yang ditampilkan pada terminal

9. Penjelasan Bagian Impor Pustaka

Bagian awal kode:

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path
```

`pandas` digunakan untuk membaca data CSV, mengelompokkan data berdasarkan sistem dan kondisi, menghitung selisih energi, serta menyimpan hasil dalam CSV. `matplotlib` digunakan untuk membuat diagram energi. `Path` digunakan untuk mengatur folder data dan output dengan lebih rapi.

Dalam Praktikum 7, penggunaan `pandas` sangat penting karena data energi biasanya berbentuk tabel. Setiap sistem memiliki beberapa spesies, dan setiap spesies memiliki energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs. Dengan `pandas`, mahasiswa dapat mengolah data tersebut secara sistematis.

10. Penjelasan Konstanta Konversi

Kode menggunakan konstanta:

```
HARTREE_TO_KJMOL = 2625.5
```

Konstanta ini digunakan untuk mengubah energi dari Hartree menjadi kJ/mol. Konversi ini penting karena nilai energi dalam Hartree sulit ditafsirkan secara kimia oleh mahasiswa pemula. Energi dalam kJ/mol lebih familiar dalam termodinamika kimia.

Contoh:

```
 $\Delta G = -0,004$  Hartree
 $\Delta G = -0,004 \times 2625,5$ 
 $\Delta G = -10,50$  kJ/mol
```

Nilai $-10,50$ kJ/mol lebih mudah dibaca sebagai perbedaan energi termodinamika daripada $-0,004$ Hartree.

11. Penjelasan Validasi Kolom Input

Kode memeriksa apakah semua kolom wajib tersedia:

```
kolom_wajib = [
    "sistem",
    "spesies",
    "peran",
    "koefisien",
    "kondisi",
    "E_Hartree",
    "H_Hartree",
    "G_Hartree",
]
```

Validasi ini penting karena kesalahan nama kolom dapat membuat perhitungan salah. Jika kolom `koefisien` tidak ada, Python tidak dapat menghitung dimerisasi dengan benar. Jika kolom `peran` salah, Python tidak dapat membedakan reaktan dan produk.

Dalam kerja ilmiah, validasi input adalah bagian dari reproduktibilitas. Kode yang baik tidak langsung menghitung data yang belum diperiksa, tetapi memastikan struktur data benar terlebih dahulu.

12. Penjelasan Fungsi `hitung_delta_per_grup`

Fungsi utama kode adalah:

```
def hitung_delta_per_grup(grup):
```

Fungsi ini bekerja pada setiap kombinasi `sistem` dan `kondisi`. Misalnya, `sistem dimer_air` pada `kondisi gas` dihitung sebagai satu grup. `Sistem protonasi_amonia` pada `kondisi pelarut` dihitung sebagai grup lain.

Di dalam fungsi, data dipisahkan menjadi reaktan dan produk:

```
reaktan = grup[grup["peran"] == "reaktan"]
produk = grup[grup["peran"] == "produk"]
```

Kemudian energi total reaktan dihitung dengan koefisien:

```
E_reaktan = (reaktan["koefisien"] * reaktan["E_Hartree"]).sum()
```

Demikian juga produk:

```
E_produk = (produk["koefisien"] * produk["E_Hartree"]).sum()
```

Selisih energi dihitung:

$$\Delta E = E_{\text{produk}} - E_{\text{reaktan}}$$

Pola yang sama digunakan untuk ΔH dan ΔG .

Fungsi ini penting karena mencegah kesalahan stoikiometri. Dimerisasi air otomatis menghitung $2 \times E_{\text{monomer}}$ jika koefisien monomer diisi 2.

13. Penjelasan Output Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG

Output utama kode adalah tabel:

tabel_delta_E_H_G.csv

Tabel ini memuat:

1. Nama sistem.
2. Kondisi.
3. Energi total reaktan.
4. Energi total produk.
5. ΔE dalam Hartree.
6. ΔE dalam kJ/mol.
7. ΔH dalam Hartree.
8. ΔH dalam kJ/mol.
9. ΔG dalam Hartree.
10. ΔG dalam kJ/mol.
11. Interpretasi sederhana berdasarkan ΔG .

Format tabel hasil:

sistem	kondisi	ΔE kJ/mol	ΔH kJ/mol	ΔG kJ/mol	interpretasi
cis_trans_2butena	gas	...	...	...	Produk/reaktan lebih menguntungkan
dimer_air	gas	...	...	...	Produk/reaktan lebih menguntungkan
protonasi_amonias	pelarut	...	...	...	Produk/reaktan lebih menguntungkan

Tabel ini menjadi inti analisis Praktikum 7.

14. Penjelasan Perbandingan Fase Gas dan Pelarut

Kode juga dapat membuat tabel perbandingan fase gas dan pelarut jika data kedua kondisi tersedia. Perbandingan ini penting karena salah satu tujuan Praktikum 7 adalah memahami efek pelarut terhadap kestabilan molekul atau spesies bermuatan.

Jika tersedia data gas dan pelarut, Python menghitung:

```
 $\Delta G_{\text{gas}}$ 
 $\Delta G_{\text{pelarut}}$ 
 $\Delta \Delta G = \Delta G_{\text{pelarut}} - \Delta G_{\text{gas}}$ 
```

Interpretasi:

$\Delta \Delta G$ negatif
→ pelarut membuat reaksi lebih menguntungkan secara Gibbs

$\Delta \Delta G$ positif
→ pelarut membuat reaksi kurang menguntungkan secara Gibbs

Namun, interpretasi ini harus dilakukan hati-hati. Pelarut dapat menstabilkan produk, reaktan, atau keduanya. Nilai $\Delta G_{\text{pelarut}}$ berubah karena perbedaan stabilisasi relatif, bukan karena pelarut selalu menstabilkan produk.

Contoh analisis:

Jika ΔG protonasi amonia lebih rendah dalam pelarut dibanding fase gas, hal ini dapat ditafsirkan bahwa pelarut polar menstabilkan spesies bermuatan, terutama NH_4^+ . Namun, interpretasi harus memperhatikan bahwa H^+ adalah model ideal dan dalam larutan nyata proton tersolvasi.

15. Diagram Energi Reaksi

Kode membuat diagram energi Gibbs dengan reaktan sebagai titik nol dan produk sebagai nilai ΔG .

Format konseptual diagram:

```
reaktan = 0 kJ/mol
produk =  $\Delta G$  kJ/mol
```

Jika produk berada di bawah reaktan, maka ΔG negatif. Jika produk berada di atas reaktan, maka ΔG positif.

Diagram energi membantu mahasiswa melihat hasil secara visual. Tabel angka sering sulit dibaca, terutama jika banyak sistem. Dengan diagram, mahasiswa dapat segera melihat sistem mana yang menguntungkan dan mana yang tidak.

Contoh interpretasi:

Diagram energi Gibbs menunjukkan bahwa produk berada lebih rendah daripada reaktan. Hal ini berarti ΔG bernilai negatif dan proses menguntungkan secara termodinamika pada kondisi yang dihitung.

Namun, diagram ini bukan diagram mekanisme reaksi lengkap. Diagram tersebut hanya membandingkan energi relatif reaktan dan produk, bukan menggambarkan keadaan transisi atau energi aktivasi.

16. Diagram Energi Bukan Diagram Kinetika

Mahasiswa harus memahami bahwa diagram energi yang dibuat pada Praktikum 7 adalah diagram termodinamika sederhana. Diagram tersebut menunjukkan perbedaan energi reaktan dan produk, bukan jalur reaksi lengkap.

Diagram Praktikum 7 menjawab:

produk lebih stabil atau tidak dibanding reaktan?

Diagram ini tidak menjawab:

berapa energi aktivasi reaksi?
bagaimana mekanisme reaksinya?
di mana keadaan transisinya?

Untuk menjawab pertanyaan kinetika, diperlukan perhitungan keadaan transisi, jalur reaksi, atau intrinsic reaction coordinate. Hal itu berada di luar fokus Praktikum 7.

Pernyataan laporan yang baik:

Diagram energi yang dibuat dalam praktikum ini menunjukkan perbedaan energi Gibbs antara reaktan dan produk. Diagram ini digunakan untuk analisis termodinamika, bukan untuk menyimpulkan energi aktivasi atau mekanisme reaksi.

17. Contoh Analisis untuk cis-trans 2-butena

Untuk isomerisasi cis-trans 2-butena:

cis-2-butena $\rightarrow$ trans-2-butena

Python menghitung:

```

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

$$\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$$

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

```

Jika ΔG bernilai negatif, maka trans-2-butena lebih stabil secara Gibbs daripada cis-2-butena. Analisis kimianya dikaitkan dengan tolakan sterik.

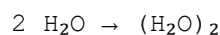
Contoh paragraf laporan:

Hasil Python menunjukkan bahwa ΔG isomerisasi cis-2-butena menjadi trans-2-butena bernilai negatif. Hal ini menunjukkan bahwa trans-2-butena lebih stabil secara termodinamika pada tingkat teori yang digunakan. Kestabilan trans dapat dijelaskan oleh tolakan sterik yang lebih kecil antara gugus metil dibandingkan pada isomer cis.

Jika ΔG positif, maka berdasarkan data tersebut cis lebih stabil. Namun, mahasiswa harus memeriksa apakah struktur, metode, dan data energi sudah benar, karena secara umum trans-2-butena diharapkan lebih stabil akibat faktor sterik.

18. Contoh Analisis untuk Dimer Air

Untuk dimer air:



Python menghitung:

```

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}} \\ \Delta H &= H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}} \\ \Delta G &= G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}\end{aligned}$$

```

Jika ΔE atau ΔH negatif, pembentukan dimer menguntungkan secara energi atau entalpi karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, ΔG dapat kurang negatif atau positif karena dua molekul bebas bergabung menjadi satu kompleks sehingga entropi menurun.

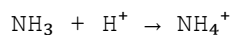
Contoh paragraf laporan:

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa pembentukan dimer air dapat menguntungkan secara energi elektronik karena adanya ikatan hidrogen. Namun, nilai ΔG perlu dianalisis secara terpisah karena dimerisasi mengurangi jumlah partikel bebas dan menurunkan entropi translasi. Oleh karena itu, ΔE dan ΔG dapat memberikan gambaran yang berbeda tentang kecenderungan dimerisasi.

Sistem ini penting untuk memahami mengapa energi elektronik tidak selalu cukup untuk menilai spontanitas.

19. Contoh Analisis untuk Protonasi Amonia

Untuk protonasi amonia:



Python menghitung:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{\text{NH}_4^+} - (E_{\text{NH}_3} + E_{\text{H}^+}) \\ \Delta H &= H_{\text{NH}_4^+} - (H_{\text{NH}_3} + H_{\text{H}^+}) \\ \Delta G &= G_{\text{NH}_4^+} - (G_{\text{NH}_3} + G_{\text{H}^+})\end{aligned}$$

Jika tersedia data gas dan pelarut, Python membandingkan:

$$\begin{aligned}\Delta G_{\text{gas}} \\ \Delta G_{\text{pelarut}}\end{aligned}$$

Analisis utama adalah efek pelarut terhadap NH_4^+ . Spesies bermuatan positif biasanya distabilkan oleh pelarut polar.

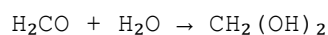
Contoh paragraf laporan:

Perbandingan ΔG fase gas dan pelarut pada protonasi amonia menunjukkan pengaruh pelarut terhadap spesies bermuatan. NH_4^+ sebagai ion positif dapat distabilkan oleh pelarut polar, sehingga nilai ΔG dalam pelarut dapat berbeda dari fase gas. Namun, reaksi dengan H^+ harus ditafsirkan sebagai model konseptual karena proton bebas dalam larutan nyata biasanya tersolvasi.

Pernyataan tersebut menunjukkan analisis kritis.

20. Contoh Analisis untuk Hidrasi Formaldehida

Untuk hidrasi formaldehida:



Python menghitung:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (E_{\text{H}_2\text{CO}} + E_{\text{H}_2\text{O}}) \\ \Delta H &= H_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (H_{\text{H}_2\text{CO}} + H_{\text{H}_2\text{O}}) \\ \Delta G &= G_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (G_{\text{H}_2\text{CO}} + G_{\text{H}_2\text{O}})\end{aligned}$$

Reaksi ini menggabungkan dua molekul menjadi satu produk. Karena itu, entropi dapat berpengaruh besar terhadap ΔG .

Contoh paragraf laporan:

Hidrasi formaldehida melibatkan adisi air pada gugus karbonil sehingga menghasilkan metanadiol. Jika ΔE atau ΔH menunjukkan produk lebih stabil tetapi ΔG kurang menguntungkan, perbedaan tersebut dapat dijelaskan oleh kontribusi entropi karena dua molekul reaktan bergabung menjadi satu produk. Pelarut juga dapat memengaruhi kestabilan relatif karena reaktan dan produk bersifat polar.

21. Contoh Analisis untuk Konformer Etanol

Untuk konformer etanol:

etanol_A $\rightarrow$ etanol_B

Python menghitung:

```

ΔE = E_B - E_A
ΔH = H_B - H_A
ΔG = G_B - G_A

```

Jika lebih dari dua konformer, energi relatif dihitung terhadap konformer dengan energi terendah.

Contoh paragraf laporan:

Perbandingan konformer etanol menunjukkan perbedaan energi yang relatif kecil. Konformer dengan ΔG paling rendah dianggap paling stabil pada tingkat teori yang digunakan. Karena selisih energi konformer dapat hanya beberapa kJ/mol, ketelitian metode, basis set, dan konversi satuan sangat penting.

Konformer etanol melatih mahasiswa membaca perbedaan energi kecil dan memahami bahwa rotasi ikatan tunggal dapat menghasilkan beberapa minimum struktur.

22. Contoh Analisis untuk Dimer Asam Asetat

Untuk dimer asam asetat:

2 CH₃COOH $\rightarrow$ (CH₃COOH)₂

Python menghitung:

```

ΔE = E_dimer - 2E_monomer
ΔH = H_dimer - 2H_monomer
ΔG = G_dimer - 2G_monomer

```

Dimer asam asetat sering distabilkan oleh dua ikatan hidrogen. Namun, proses dimerisasi mengurangi jumlah partikel bebas sehingga entropi menurun.

Contoh paragraf laporan:

Dimerisasi asam asetat dapat menguntungkan secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen antara dua monomer. Namun, nilai ΔG harus mempertimbangkan penalti entropi akibat penggabungan dua molekul bebas menjadi satu dimer. Jika pelarut polar digunakan, monomer dapat ikut distabilkan oleh pelarut sehingga kecenderungan dimerisasi dapat berubah.

Analisis ini menghubungkan ikatan hidrogen, entalpi, entropi, dan pelarut.

23. Validasi Data Sebelum Menjalankan Python

Sebelum data dimasukkan ke Python, mahasiswa harus memastikan data benar. Python tidak dapat mengetahui apakah energi yang dimasukkan berasal dari output yang valid. Jika input salah, output juga salah.

Daftar validasi data:

```
[ ] Semua spesies telah dioptimasi.
[ ] Optimasi konvergen.
[ ] Tidak ada frekuensi imajiner untuk struktur minimum.
[ ] Metode sama untuk reaktan dan produk.
[ ] Basis set sama untuk reaktan dan produk.
[ ] Model pelarut konsisten.
[ ] Muatan dan multiplicity benar.
[ ] Energi elektronik diambil dari bagian output yang tepat.
[ ] Entalpi dan Gibbs diambil dari output frekuensi.
[ ] Koefisien stoikiometri benar.
[ ] Satuan energi adalah Hartree.
[ ] Data sudah dimasukkan ke CSV dengan benar.
```

Validasi ini harus dilakukan sebelum analisis. Jika data belum valid, hasil Python tidak boleh langsung digunakan dalam laporan.

24. Kesalahan Umum dalam Jalur Python Mandiri

Beberapa kesalahan umum dalam jalur Python mandiri adalah:

Kesalahan	Dampak
Tidak menggunakan koefisien stoikiometri	Dimerisasi dan reaksi multikomponen salah
Salah menulis peran reaktan/produk	Tanda ΔE , ΔH , dan ΔG terbalik
Mencampur Hartree dan kJ/mol	Hasil numerik salah
Mengonversi energi absolut setelah pembulatan kasar	Selisih energi tidak akurat
Tidak membedakan E, H, dan G	Analisis termodinamika keliru
Membandingkan fase gas dan pelarut tidak lengkap	Efek pelarut tidak valid

Tidak menyimpan CSV	Hasil sulit diverifikasi
Menganggap diagram energi sebagai diagram mekanisme	Salah memahami termodinamika dan kinetika
Tidak menyebut data latihan atau data aktual	Laporan tidak transparan
Tidak memeriksa output software sebelum memasukkan data	Python mengolah data yang salah

Kesalahan-kesalahan ini harus dijadikan daftar periksa saat mahasiswa menjalankan kode.

25. Analisis Kritis terhadap Hasil Python

Hasil Python harus ditafsirkan secara kritis. Python hanya menghitung berdasarkan data yang dimasukkan. Jika data input berasal dari metode yang tidak konsisten, maka hasil ΔE , ΔH , dan ΔG juga tidak valid. Jika data entalpi atau Gibbs diambil dari bagian output yang salah, Python tetap menghitung, tetapi kesimpulan menjadi keliru.

Analisis kritis yang perlu dilakukan:

1. Apakah ΔE , ΔH , dan ΔG memiliki tanda yang masuk akal?
2. Apakah perbedaan ΔH dan ΔG dapat dijelaskan oleh entropi?
3. Apakah sistem dimerisasi menunjukkan penalti entropi?
4. Apakah spesies bermuatan lebih stabil dalam pelarut?
5. Apakah perbandingan fase gas dan pelarut dihitung dengan model konsisten?
6. Apakah diagram energi sesuai dengan tabel CSV?
7. Apakah kesimpulan tidak melampaui data?

Contoh pernyataan kritis:

Hasil Python menunjukkan bahwa ΔH dimerisasi negatif, tetapi ΔG kurang menguntungkan. Perbedaan ini menunjukkan bahwa pembentukan ikatan hidrogen menstabilkan dimer secara entalpi, tetapi penggabungan dua molekul menjadi satu kompleks menurunkan entropi translasi sehingga energi bebas Gibbs menjadi kurang menguntungkan.

Pernyataan tersebut lebih baik daripada sekadar menulis “dimer terbentuk karena energinya negatif”.

26. Implikasi Pedagogis Jalur Python Mandiri

Jalur Python mandiri memiliki implikasi pedagogis penting. Pertama, mahasiswa belajar menghitung energi reaksi secara sistematis. Kedua, mahasiswa belajar bahwa stoikiometri harus masuk dalam perhitungan energi. Ketiga, mahasiswa belajar membedakan energi elektronik, entalpi, dan Gibbs. Keempat, mahasiswa belajar bahwa konversi satuan bukan formalitas, tetapi

menentukan interpretasi kimia. Kelima, mahasiswa belajar bahwa pelarut dapat mengubah kestabilan relatif spesies. Keenam, mahasiswa belajar menyimpan data secara reproduibel.

Secara pedagogis, Python mengubah praktikum dari sekadar membaca output menjadi proses analisis ilmiah:

```
data mentah
→ perhitungan terstruktur
→ tabel hasil
→ visualisasi
→ interpretasi
→ kesimpulan
```

Dengan alur ini, mahasiswa tidak hanya menjadi pengguna software, tetapi menjadi analis data kimia komputasi.

27. Output yang Harus Dihasilkan dari Jalur Python

Jalur Python mandiri harus menghasilkan output berikut:

1. Tabel energi reaktan dan produk.
2. Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG .
3. Diagram energi reaksi.
4. Grafik perbandingan fase gas dan pelarut.
5. File CSV hasil analisis.

Nama file output yang dianjurkan:

```
tabel_energi_reaktan_produk.csv
tabel_delta_E_H_G.csv
perbandingan_fase_gas_pelarut.csv
diagram_energi_gibbs_nama_sistem.png
grafik_perbandingan_gas_pelarut.png
```

Output ini akan dibahas lebih rinci pada subbab 10.8. Pada subbab 10.6, fokusnya adalah bagaimana kode Python menghasilkan output tersebut.

28. Transisi ke Nama File Kode

Subbab 10.6 telah membahas jalur Python mandiri dalam Praktikum 7. Kode Python menerima input energi reaktan dan produk, menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , mengonversi Hartree ke kJ/mol, membandingkan fase gas dan pelarut, serta membuat diagram energi reaksi. Jalur ini mengubah output komputasi menjadi tabel dan grafik yang dapat digunakan dalam laporan.

Subbab berikutnya akan membahas nama file kode. Pada subbab 10.7, kode Python yang digunakan dalam Praktikum 7 akan diberi nama baku `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`. Penamaan file yang konsisten penting agar kode mudah dikenali, mudah dikumpulkan, mudah dijalankan, dan dapat ditelusuri kembali ke data serta output praktikum.

10.7 Nama File Kode

Nama file kode untuk Praktikum 7 adalah:

`praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`

Nama file ini digunakan untuk menyimpan kode Python jalur mandiri yang telah dijelaskan pada subbab 10.6. File tersebut berfungsi untuk mengolah data energi reaktan dan produk, menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , mengonversi satuan Hartree ke kJ/mol, membandingkan hasil fase gas dan pelarut, membuat diagram energi reaksi, serta menyimpan file CSV hasil analisis.

Penamaan file dalam praktikum kimia komputasi bukan hal administratif semata. Nama file adalah bagian dari tata kelola data ilmiah. Dalam praktikum yang melibatkan banyak struktur, banyak output, banyak sistem reaksi, banyak kondisi fase, dan banyak jenis energi, nama file yang tidak jelas dapat menyebabkan data tertukar. Jika data tertukar, maka hasil ΔE , ΔH , dan ΔG dapat salah, meskipun rumus yang digunakan benar. Oleh karena itu, nama file `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` harus digunakan secara konsisten.

Nama file yang baik harus memenuhi lima syarat utama:

1. **Jelas**, sehingga pembaca langsung mengetahui isi file.
2. **Konsisten**, sehingga sesuai dengan urutan praktikum.
3. **Ringkas**, sehingga mudah ditulis dan dijalankan.
4. **Teknis**, sehingga aman digunakan di berbagai sistem operasi.
5. **Reprodusibel**, sehingga hubungan antara kode, data, output, dan laporan dapat ditelusuri kembali.

Dengan nama `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`, mahasiswa langsung mengetahui bahwa file tersebut adalah kode Python untuk Praktikum 7 tentang energi reaksi dan termodinamika.

1. Makna Nama File dalam Praktikum 7

Nama file `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` mengandung informasi penting tentang identitas praktikum dan fungsi kode.

Struktur namanya dapat diuraikan sebagai berikut:

Unsur Nama File	Makna
praktikum	Menunjukkan bahwa file ini bagian dari kegiatan praktikum
07	Menunjukkan bahwa file digunakan untuk Praktikum 7
energi_reaksi_termodinamika	Menunjukkan topik utama kode
.py	Menunjukkan bahwa file adalah skrip Python

Dengan struktur tersebut, nama file menjadi informatif. Pembaca tidak perlu membuka file untuk mengetahui bahwa kode ini berkaitan dengan energi reaksi dan termodinamika. Nama ini juga membedakan file Praktikum 7 dari file praktikum sebelumnya, misalnya:

```
praktikum_06_spektrum_ir.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Konsistensi seperti ini penting dalam buku praktikum karena setiap bab memiliki file kode tersendiri. Jika semua file diberi nama secara sistematis, mahasiswa dapat mengelola folder praktikum dengan lebih rapi.

2. Alasan Menggunakan Angka 07

Angka 07 menunjukkan bahwa file ini digunakan untuk Praktikum 7. Penulisan dua digit sengaja dipilih agar urutan file tetap rapi ketika disusun secara alfabetis atau numerik.

Contoh urutan yang baik:

```
praktikum_01_pengantar.py
praktikum_02_struktur_molekul.py
praktikum_03_hartree_fock_basis_set.py
praktikum_04_dft_homo_lumo.py
praktikum_05_simetri_momen_dipol.py
praktikum_06_spektrum_ir.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Jika nomor hanya ditulis satu digit, misalnya `praktikum_7.py`, maka pengurutan file dapat menjadi kurang rapi ketika jumlah praktikum mencapai dua digit. Misalnya, `praktikum_10.py` dapat muncul sebelum `praktikum_7.py` pada sebagian sistem pengurutan alfabetis. Dengan penulisan 07, urutan file lebih stabil dan mudah dibaca.

Penulisan angka dua digit juga menunjukkan bahwa kode ini merupakan bagian dari seri praktikum yang terstruktur, bukan file lepas yang berdiri sendiri.

3. Alasan Menggunakan Frasa `energi_reaksi_termodinamika`

Frasa `energi_reaksi_termodinamika` dipilih karena mewakili inti Praktikum 7. Praktikum ini memang juga membahas efek pelarut, tetapi inti komputasinya adalah perhitungan energi reaksi dan besaran termodinamika. Efek pelarut dianalisis melalui perubahan energi relatif antara fase gas dan pelarut. Oleh karena itu, frasa `energi_reaksi_termodinamika` cukup mewakili keseluruhan fungsi kode.

Nama file lain yang mungkin tetapi kurang tepat:

```
praktikum_07_delta_g.py
praktikum_07_pelarut.py
praktikum_07_energi.py
praktikum_07_reaksi.py
praktikum_07_thermo.py
```

Nama-nama tersebut kurang lengkap. `delta_g` hanya menekankan energi bebas Gibbs, padahal kode juga menghitung ΔE dan ΔH . `pelarut` hanya menekankan efek pelarut, padahal kode juga menghitung energi reaksi fase gas. `energi` terlalu umum. `reaksi` terlalu pendek. `thermo` menggunakan istilah singkat yang kurang sesuai untuk dokumen berbahasa Indonesia.

Nama yang disetujui:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Nama ini lebih tepat karena mencakup energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, dan analisis termodinamika.

4. Alasan Menggunakan Huruf Kecil dan Garis Bawah

Nama file menggunakan huruf kecil dan garis bawah. Pola ini dikenal sebagai gaya **snake_case**. Dalam pemrograman Python dan pengelolaan file ilmiah, **snake_case** banyak digunakan karena mudah dibaca, mudah diketik, dan aman digunakan pada berbagai sistem operasi.

Nama yang benar:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Nama yang sebaiknya dihindari:

```
Praktikum 07 Energi Reaksi Termodinamika.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
PRAKTIKUM_07_ENERGI_REAKSI_TERMODINAMIKA.py
praktikum-07-energi-reaksi-termodinamika.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika final.py
```

Spasi dalam nama file dapat menyulitkan pemanggilan melalui terminal. Huruf kapital yang tidak konsisten dapat menimbulkan masalah pada sistem operasi yang membedakan huruf besar dan kecil. Tanda hubung dapat digunakan pada nama file umum, tetapi garis bawah lebih lazim dalam file Python. Tambahan kata seperti `final`, `fix`, atau `revisi_baru` juga sebaiknya tidak digunakan pada file `final` karena dapat membingungkan.

5. Ekstensi .py sebagai Identitas File Python

Ekstensi `.py` menunjukkan bahwa file tersebut adalah skrip Python. Ekstensi ini wajib digunakan. Jika ekstensi salah, file mungkin tidak dapat dijalankan sebagai kode Python.

Nama yang benar:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Nama yang salah:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.txt
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.docx
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.pdf
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py.txt
```

Kesalahan `py.txt` sering terjadi pada Windows jika ekstensi file disembunyikan. Mahasiswa mungkin mengira file sudah berekstensi `.py`, padahal sebenarnya masih file teks. Oleh karena itu, sebelum dikumpulkan, file harus diperiksa melalui pengaturan tampilan ekstensi file atau melalui terminal.

Cara menjalankan file:

```
python praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

atau pada sistem tertentu:

```
python3 praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Jika file berada dalam folder `kode`, perintahnya dapat ditulis:

```
python kode/praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

6. Hubungan Nama File dengan Isi Kode

Nama file harus sesuai dengan isi kode. File `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` minimal harus memuat fungsi-fungsi berikut:

1. Membaca input energi reaktan dan produk.
2. Membaca koefisien stoikiometri.
3. Membedakan peran reaktan dan produk.
4. Menghitung energi total reaktan.
5. Menghitung energi total produk.
6. Menghitung ΔE .
7. Menghitung ΔH .
8. Menghitung ΔG .
9. Mengonversi Hartree ke kJ/mol.
10. Membandingkan fase gas dan pelarut.
11. Membuat diagram energi reaksi.
12. Menyimpan CSV hasil analisis.
13. Menyimpan grafik hasil analisis.

Jika file bernama `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`, tetapi isinya hanya kode untuk menggambar molekul atau membaca spektrum IR, maka nama file tidak sesuai. Nama file ilmiah harus mencerminkan isi dan fungsinya.

Kerangka awal file dapat ditulis:

```
# =====
# PRAKTIKUM 7
# ENERGI REAKSI, TERMODINAMIKA, DAN EFEK PELARUT
# -----
# Nama file : praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
# Fungsi  : Menghitung  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ , dan  $\Delta G$  dari data energi
#            reaktan-produk, mengonversi Hartree ke kJ/mol,
#            membandingkan fase gas dan pelarut, serta
#            membuat diagram energi reaksi.
# =====

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from pathlib import Path
```

Komentar awal seperti ini membantu pembaca memahami tujuan file sebelum membaca kode lebih jauh.

7. Metadata yang Dianjurkan di Awal File

Selain nama file, kode sebaiknya memuat metadata. Metadata membantu dosen, mahasiswa, atau pembaca lain menelusuri asal data dan kondisi perhitungan.

Contoh metadata:

```
# =====
# PRAKTIKUM 7
```

```
# ENERGI REAKSI, TERMODINAMIKA, DAN EFEK PELARUT
# -----
# Nama file      : praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
# Topik         :  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ , efek pelarut
# Sumber data    : Output ChemCompute / GAMESS / ORCA / Gaussian / Psi4 / PySCF
# Satuan input   : Hartree
# Satuan output  : kJ/mol
# Output         : CSV dan diagram energi reaksi
# =====
```

Jika digunakan untuk tugas mahasiswa, dapat ditambahkan:

```
# Nama mahasiswa :
# NIM            :
# Kelas          :
# Tanggal        :
# Metode         :
# Basis set      :
# Model pelarut  :
```

Metadata ini penting karena energi reaksi sangat bergantung pada metode, basis set, model pelarut, dan kondisi perhitungan. Tanpa metadata, data sulit diverifikasi.

8. Hubungan Nama File dengan Input Data

File `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` bekerja dengan input data energi. Input tersebut dapat berasal dari tabel manual atau file CSV. Nama file input yang dianjurkan adalah:

`data_energi_reaktan_produk.csv`

File input tersebut sebaiknya berada dalam folder:

`data/`

Struktur hubungan data:

```
data/data_energi_reaktan_produk.csv
→ kode/praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
→ output_praktikum_07/tabel_delta_E_H_G.csv
→ output_praktikum_07/diagram_energi_reaksi.png
```

Format minimal file input:

sistem	spesies	peran	koefisien	kondisi	E_Hartree	H_Hartree	G_Hartree
cis_trans_2butena	cis_2butena	reaktan	1	gas	...	...	...

cis_trans_2butena	trans_2butena	produk	1	gas	...	...	...
dimer_air	h2o_monomer	reaktan	2	gas	...	...	...
dimer_air	h2o_dimer	produk	1	gas	...	...	...

Kolom koefisien sangat penting karena reaksi seperti dimer air dan dimer asam asetat menggunakan dua monomer sebagai reaktan. Jika koefisien tidak dicatat, perhitungan dapat salah.

9. Hubungan Nama File dengan Output Kode

File `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` menghasilkan beberapa output. Output tersebut harus disimpan dalam folder yang jelas, misalnya:

```
output_praktikum_07/
```

Nama output yang dianjurkan:

```
tabel_energi_reaktan_produk.csv
tabel_delta_E_H_G.csv
perbandingan_fase_gas_pelarut.csv
diagram_energi_gibbs_cis_trans_2butena_gas.png
diagram_energi_gibbs_dimer_air_gas.png
diagram_energi_gibbs_protonasi_amonia_pelarut.png
grafik_perbandingan_gas_pelarut.png
```

Hubungan antara nama file kode dan output harus jelas:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
→ menghitung  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ 
→ menyimpan tabel dan grafik Praktikum 7
```

Jika output diberi nama terlalu umum seperti `hasil.csv`, `data.csv`, atau `grafik.png`, maka file sulit dikenali. Nama output harus menunjukkan isi file.

10. Struktur Folder yang Dianjurkan

Struktur folder Praktikum 7 sebaiknya disusun sebagai berikut:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika/
├── struktur_awal/
│   ├── cis_2butena.xyz
│   └── trans_2butena.xyz
```



```

├── nh3.xyz
├── nh4_plus.xyz
├── formaldehida.xyz
├── metanadiol.xyz
├── h2o_monomer.xyz
├── h2o_dimer.xyz
├── etanol_konformer_A.xyz
├── etanol_konformer_B.xyz
├── asam_asetat_monomer.xyz
├── asam_asetat_dimer.xyz
├── output_chemcompute/
│   ├── cis_2butena_gas.log
│   ├── trans_2butena_gas.log
│   ├── nh3_gas.log
│   ├── nh4_gas.log
│   ├── nh3_pelarut.log
│   ├── nh4_pelarut.log
│   ├── dimer_air_gas.log
│   └── asam_asetat_dimer_gas.log
├── data/
│   └── data_energi_reaktan_produk.csv
├── kode/
│   └── praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
├── output_praktikum_07/
│   ├── tabel_energi_reaktan_produk.csv
│   ├── tabel_delta_E_H_G.csv
│   ├── perbandingan_fase_gas_pelarut.csv
│   ├── diagram_energi_gibbs_cis_trans_2butena_gas.png
│   ├── diagram_energi_gibbs_dimer_air_gas.png
│   └── grafik_perbandingan_gas_pelarut.png
├── laporan/
│   └── laporan_praktikum_07.docx

```

Struktur tersebut membantu mahasiswa menjaga keterlacakan. Setiap grafik dalam laporan dapat ditelusuri ke file CSV, setiap CSV dapat ditelusuri ke kode Python, dan setiap data energi dapat ditelusuri ke output ChemCompute atau software komputasi.

11. Reprodusibilitas dan Keterlacakan File

Dalam komputasi ilmiah, reprodusibilitas berarti hasil dapat dibuat ulang dari data dan kode yang sama. Nama file yang baik membantu reprodusibilitas karena membuat alur kerja mudah diikuti.

Alur reprodusibilitas Praktikum 7:

```

struktur awal
→ output ChemCompute/software

```

- data energi CSV
- praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
- tabel ΔE , ΔH , ΔG
- diagram energi
- laporan praktikum

Jika salah satu bagian hilang, reproduibilitas melemah. Misalnya, jika laporan berisi diagram energi tetapi file kode tidak tersedia, pembaca tidak dapat memeriksa bagaimana diagram dibuat. Jika kode tersedia tetapi data CSV tidak ada, kode tidak dapat dijalankan ulang. Jika data CSV tersedia tetapi output komputasi tidak disimpan, asal angka energi tidak dapat diverifikasi.

Nama file `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` menjadi pusat alur reproduibilitas karena file ini menghubungkan data energi dengan hasil analisis.

12. Versi File Selama Pengerjaan

Selama pengerjaan, mahasiswa mungkin membuat beberapa versi kode. Revisi dapat terjadi karena perbaikan data, perbaikan rumus stoikiometri, penambahan grafik, atau perbaikan format output. Versi sementara boleh dibuat, tetapi harus dikelola secara rapi.

Nama versi sementara yang dianjurkan:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika_v01.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika_v02.py
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika_v03.py
```

Namun, file final yang dikumpulkan harus menggunakan nama baku:

```
praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Nama versi yang tidak dianjurkan:

```
fix.py
fix_baru.py
fix_banget.py
akhir.py
final.py
final_revisi_terakhir.py
energi_bener.py
kode_paling_baru.py
```

Nama seperti itu tidak profesional dan sulit ditelusuri. Dalam kerja ilmiah, versi harus dikelola dengan jelas.

Jika mahasiswa menggunakan Git, perubahan kode dapat dilacak lebih rapi. Namun, untuk praktikum dasar, penamaan versi yang sistematis sudah cukup untuk melatih disiplin kerja digital.

13. Cara Menjalankan File

Jika file berada di folder utama, kode dapat dijalankan dengan:

```
python praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Jika file berada di folder kode, kode dapat dijalankan dengan:

```
python kode/praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Pada sebagian sistem, perintahnya:

```
python3 kode/praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Agar kode berjalan dengan baik, jalur file input harus benar. Misalnya:

```
file_input = Path("data") / "data_energi_reaktan_produk.csv"
```

Jalur relatif seperti ini lebih baik daripada jalur absolut:

```
C:/Users>Nama/Desktop/praktikum_07/data/data_energi_reaktan_produk.csv
```

Jalur absolut membuat kode sulit dijalankan di komputer lain. Jalur relatif mendukung reproduktibilitas karena struktur folder dapat dipindahkan tanpa mengubah isi kode secara besar.

14. Catatan Teknis untuk Windows

Pada Windows, mahasiswa perlu memperhatikan beberapa hal teknis.

Pertama, pastikan ekstensi file terlihat. Jika ekstensi file disembunyikan, file dapat tampak seperti .py, padahal sebenarnya .py.txt.

Kedua, simpan file dengan encoding UTF-8. Ini penting karena kode dan komentar dapat memuat simbol seperti Δ , ₂, ₃, atau istilah kimia lain.

Ketiga, hindari spasi pada nama folder yang terlalu panjang jika menggunakan terminal. Meskipun Python dapat menangani spasi, folder tanpa spasi lebih mudah digunakan.

Keempat, pastikan Python dan pustaka yang diperlukan sudah terpasang. Pustaka minimal yang digunakan adalah:

```
pandas
matplotlib
```

Kelima, jika menjalankan dari PowerShell atau Command Prompt, pastikan posisi direktori kerja benar.

Contoh:

```
cd praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika
python kode/praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
```

Jika kode tidak menemukan file CSV, kemungkinan besar direktori kerja tidak sesuai atau file input belum berada di folder data.

15. Standar Minimal Isi File yang Dikumpulkan

File `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` yang dikumpulkan minimal harus mampu melakukan hal berikut:

1. Membaca data energi reaktan dan produk.
2. Memvalidasi kolom input.
3. Menggunakan koefisien stoikiometri.
4. Membedakan reaktan dan produk.
5. Menghitung total energi reaktan.
6. Menghitung total energi produk.
7. Menghitung ΔE .
8. Menghitung ΔH .
9. Menghitung ΔG .
10. Mengonversi Hartree ke kJ/mol.
11. Membandingkan fase gas dan pelarut jika data tersedia.
12. Membuat diagram energi reaksi.
13. Menyimpan tabel hasil dalam CSV.
14. Menyimpan grafik dalam format gambar.
15. Dapat dijalankan tanpa error.

Jika file tidak dapat dijalankan, hasil praktikum sulit diverifikasi. Jika file dapat dijalankan tetapi output tidak sesuai data, mahasiswa harus memeriksa kembali input dan logika perhitungan.

16. Daftar Periksa Sebelum Pengumpulan

Sebelum mengumpulkan file, mahasiswa harus memeriksa hal berikut:

```
[ ] Nama file sudah tepat: praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
[ ] File berekstensi .py, bukan .txt
[ ] File dapat dijalankan tanpa error
[ ] Data input berada di folder data
```

[] Nama file input sesuai dengan kode
 [] Kolom input lengkap
 [] Koefisien stoikiometri benar
 [] Peran reaktan dan produk benar
 [] Satuan input adalah Hartree
 [] Konversi Hartree ke kJ/mol benar
 [] Output CSV terbentuk
 [] Diagram energi terbentuk
 [] Grafik perbandingan gas dan pelarut terbentuk jika data tersedia
 [] Hasil output sesuai dengan laporan
 [] Tidak ada jalur absolut yang hanya berlaku di satu komputer
 [] Komentar kode cukup jelas

Daftar periksa ini membantu mahasiswa memastikan bahwa kode siap dikumpulkan dan dapat diperiksa ulang.

17. Hubungan Nama File dengan Penilaian Praktikum

Nama file baku memudahkan penilaian. Jika semua mahasiswa mengumpulkan file dengan nama yang sama, dosen dapat memeriksa kode secara lebih sistematis. Jika file diberi nama sembarangan, penilaian menjadi lebih lambat dan berisiko tertukar.

Instruksi pengumpulan dapat ditulis:

Kumpulkan file kode Python dengan nama:
 praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py

Jika sistem pengumpulan otomatis digunakan, nama file yang salah dapat menyebabkan file tidak terbaca atau tidak terdeteksi. Oleh karena itu, mengikuti nama file baku merupakan bagian dari disiplin praktikum.

Nama file yang benar juga menunjukkan bahwa mahasiswa memahami struktur kegiatan. Praktikum 7 bukan sekadar tugas bebas, tetapi bagian dari alur pembelajaran yang sudah dirancang.

18. Kesalahan Umum dalam Penamaan File

Beberapa kesalahan umum dalam penamaan file adalah:

Kesalahan	Contoh	Dampak
Menggunakan spasi	praktikum 07 energi reaksi.py	Sulit dipanggil melalui terminal

Tidak memakai nomor praktikum	energi_reaksi.py	Tidak jelas praktikum beberapa
Terlalu umum	kode.py	Tidak informatif
Terlalu pendek	energi.py	Sulit dibedakan
Ekstensi salah	praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.txt	Tidak dikenali sebagai Python
Ekstensi ganda	praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py.txt	Dapat gagal dijalankan
Nama tidak sesuai isi	praktikum_07_spektrum_ir.py	Menyesatkan
Banyak versi tidak jelas	fix.py, final.py, final2.py	Sulit menentukan file final
Huruf kapital tidak konsisten	Praktikum_07_Energi.py	Kurang rapi dan dapat bermasalah di sistem tertentu

Mahasiswa harus menghindari kesalahan tersebut. Penamaan file yang benar adalah bagian dari literasi komputasi ilmiah.

19. Integritas Akademik dan File Kode

File kode adalah bagian dari bukti akademik. Jika laporan menyatakan bahwa nilai ΔG diperoleh dari perhitungan Python, maka file Python harus dapat menghasilkan nilai tersebut dari data input yang sesuai. Jika laporan memuat diagram energi, diagram tersebut harus dapat ditelusuri ke kode dan data.

Alur integritas data:

```

output komputasi
→ data_energi_reaktan_produk.csv
→ praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
→ tabel_delta_E_H_G.csv
→ diagram energi
→ laporan

```

Jika salah satu hubungan tersebut tidak konsisten, integritas laporan melemah. Misalnya, jika laporan menampilkan nilai ΔG yang tidak ada dalam CSV, maka pembaca tidak dapat memverifikasi hasil. Jika grafik tidak sesuai tabel, berarti ada masalah dalam proses analisis.

Mahasiswa boleh menggunakan template kode dari buku atau dosen, tetapi harus mengganti data latihan dengan data hasil perhitungan sendiri. Menyalin output orang lain tanpa memahami prosesnya bertentangan dengan tujuan praktikum.

20. Implikasi Pedagogis Penamaan File

Penamaan file memiliki implikasi pedagogis yang sering diabaikan. Dalam kimia komputasi, mahasiswa tidak hanya belajar teori dan software, tetapi juga belajar mengelola data ilmiah. Penamaan file yang rapi membentuk kebiasaan kerja yang baik.

Melalui file `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`, mahasiswa belajar bahwa:

1. Setiap praktikum memiliki identitas kode.
2. Setiap kode memiliki hubungan dengan data input.
3. Setiap output harus dapat ditelusuri ke kode.
4. Setiap grafik harus berasal dari data yang dapat diverifikasi.
5. Setiap laporan harus didukung oleh file yang dapat dijalankan ulang.
6. Penamaan yang konsisten mendukung reproduibilitas.
7. Kerapian digital merupakan bagian dari etika ilmiah.

Dalam literatur reproduibilitas komputasi, prinsip keterlacakan kode, data, dan output selalu ditekankan. Praktikum 7 menerapkan prinsip tersebut dalam bentuk sederhana yang dapat dilakukan mahasiswa.

21. Transisi ke Output Kode

Subbab 10.7 telah menetapkan nama file kode untuk Praktikum 7, yaitu:

`praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`

Nama file tersebut dipilih karena jelas, konsisten, dan sesuai dengan fungsi kode. File ini digunakan untuk menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , mengonversi Hartree ke kJ/mol, membandingkan fase gas dan pelarut, membuat diagram energi reaksi, serta menyimpan CSV hasil analisis.

Subbab berikutnya akan membahas output kode. Pada subbab 10.8, mahasiswa akan mempelajari bentuk output yang harus dihasilkan dari file `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`, yaitu tabel energi reaktan dan produk, tabel ΔE , ΔH , dan ΔG , diagram energi reaksi, grafik perbandingan fase gas dan pelarut, serta file CSV hasil analisis. Dengan demikian, subbab 10.8 akan menjelaskan bagaimana hasil kode disusun, disimpan, diperiksa, dan digunakan dalam laporan praktikum.

10.8 Output Kode

Output kode dalam Praktikum 7 adalah hasil yang diperoleh setelah file `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` dijalankan. Output ini berfungsi sebagai bukti numerik dan visual dari proses analisis energi reaksi, entalpi, energi bebas Gibbs, serta efek pelarut. Dalam praktikum kimia komputasi, output kode tidak boleh dipahami hanya sebagai file hasil sampingan. Output adalah bagian dari rantai ilmiah yang menghubungkan **data energi dari software komputasi, perhitungan selisih energi, konversi satuan, interpretasi termodinamika, dan penyusunan laporan.**

Output kode Praktikum 7 meliputi lima komponen utama:

1. **Tabel energi reaktan dan produk.**
2. **Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG .**
3. **Diagram energi reaksi.**
4. **Grafik perbandingan fase gas dan pelarut.**
5. **File CSV hasil analisis.**

Kelima output tersebut saling berhubungan. Tabel energi reaktan dan produk menjadi data dasar. Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG menjadi hasil perhitungan utama. Diagram energi reaksi menyajikan hasil secara visual. Grafik perbandingan fase gas dan pelarut menunjukkan pengaruh lingkungan terhadap kestabilan relatif. File CSV menjadi bukti data yang dapat diperiksa ulang dan digunakan kembali.

Alur output kode dapat diringkas sebagai berikut:

```
data energi reaktan dan produk
→ perhitungan  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ , dan  $\Delta G$ 
→ konversi Hartree ke kJ/mol
→ tabel hasil
→ diagram energi reaksi
→ grafik perbandingan fase gas dan pelarut
→ CSV hasil analisis
→ laporan praktikum
```

Dengan alur tersebut, mahasiswa belajar bahwa hasil komputasi harus dapat ditelusuri. Setiap angka ΔE , ΔH , dan ΔG dalam laporan harus berasal dari data energi reaktan dan produk yang jelas. Setiap diagram energi harus dapat ditelusuri ke tabel hasil. Setiap kesimpulan tentang kestabilan, spontanitas termodinamika, atau efek pelarut harus didasarkan pada output yang dapat diverifikasi.

1. Makna Output Kode dalam Praktikum 7

Output kode adalah bentuk akhir dari pengolahan data energi yang telah diperoleh dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, atau software kimia komputasi lain. Data mentah dari software biasanya berupa energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs untuk masing-masing spesies. Python kemudian mengubah data tersebut menjadi selisih energi reaksi.

Secara konseptual:

```
energi masing-masing spesies
→ energi total reaktan
→ energi total produk
→ selisih energi
→ interpretasi termodinamika
```

Output kode memiliki empat fungsi utama.

Pertama, output kode berfungsi sebagai **rekaman numerik**. Tabel energi menyimpan data reaktan dan produk, sedangkan tabel ΔE , ΔH , dan ΔG menyimpan hasil perhitungan.

Kedua, output kode berfungsi sebagai **alat visualisasi**. Diagram energi reaksi membantu mahasiswa melihat apakah produk lebih stabil atau kurang stabil dibanding reaktan.

Ketiga, output kode berfungsi sebagai **alat interpretasi**. Grafik perbandingan fase gas dan pelarut membantu mahasiswa memahami bagaimana pelarut mengubah kestabilan relatif.

Keempat, output kode berfungsi sebagai **bukti reproduibilitas**. File CSV memungkinkan hasil diperiksa ulang, dihitung ulang, atau dibandingkan dengan metode lain.

Dalam literatur kimia komputasi, reproduibilitas selalu menjadi aspek penting. Perhitungan energi tidak cukup dilaporkan sebagai angka akhir. Data asal, metode, satuan, koreksi termal, dan proses pengolahan harus dapat ditelusuri. Output kode Praktikum 7 dirancang untuk melatih kebiasaan tersebut.

2. Struktur Folder Output

Agar hasil tertata rapi, semua output kode Praktikum 7 sebaiknya disimpan dalam folder:

```
output_praktikum_07/
```

Isi folder tersebut dapat berupa:

```
output_praktikum_07/
├── tabel_energi_reaktan_produk.csv
├── tabel_delta_E_H_G.csv
├── perbandingan_fase_gas_pelarut.csv
├── diagram_energi_gibbs_cis_trans_2butena_gas.png
├── diagram_energi_gibbs_protonasi_amonia_gas.png
├── diagram_energi_gibbs_protonasi_amonia_pelarut.png
├── diagram_energi_gibbs_hidrasi_formaldehida_gas.png
├── diagram_energi_gibbs_dimer_air_gas.png
├── diagram_energi_gibbs_konformer_etanol_gas.png
├── diagram_energi_gibbs_asam_asetat_dimer_gas.png
└── grafik_perbandingan_gas_pelarut.png
```

Struktur ini penting karena Praktikum 7 menghasilkan beberapa jenis output. Jika semua file dibiarkan bercampur dengan input, struktur awal, output ChemCompute, dan laporan, mahasiswa akan kesulitan mencari data. Pemisahan folder membantu menjaga keterlacakan.

Struktur folder yang baik:

```
data/
→ menyimpan input energi

kode/
→ menyimpan file Python

output_praktikum_07/
→ menyimpan hasil analisis Python

laporan/
→ menyimpan laporan tertulis
```

Dengan struktur ini, hubungan antara data, kode, output, dan laporan menjadi jelas.

3. Output 1: Tabel Energi Reaktan dan Produk

Output pertama adalah **tabel energi reaktan dan produk**. Tabel ini memuat data energi dasar untuk setiap spesies yang digunakan dalam sistem reaksi. Tabel ini sangat penting karena semua nilai ΔE , ΔH , dan ΔG berasal dari data di dalamnya.

Nama file yang dianjurkan:

```
tabel_energi_reaktan_produk.csv
```

Kolom minimal yang harus ada:

Kolom	Fungsi
sistem	Nama sistem reaksi
spesies	Nama molekul atau ion
peran	Reaktan atau produk
koefisien	Koefisien stoikiometri
kondisi	Gas atau pelarut
E_Hartree	Energi elektronik
H_Hartree	Entalpi
G_Hartree	Energi bebas Gibbs

Contoh format tabel:

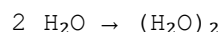
sistem	spesies	peran	koefisien	kondisi	E_Hartree	H_Hartree	G_Hartree
cis_trans_2butena	cis_2butena	reaktan	1	gas	...	...	...
cis_trans_2butena	trans_2butena	produk	1	gas	...	...	...
dimer_air	h2o_monomer	reaktan	2	gas	...	...	...
dimer_air	h2o_dimer	produk	1	gas	...	...	...

Tabel ini harus memuat data dalam satuan Hartree jika data berasal langsung dari output kimia kuantum. Konversi ke kJ/mol dilakukan setelah selisih energi dihitung. Hal ini menghindari kesalahan pembulatan pada energi absolut.

4. Fungsi Kolom Koefisien dalam Tabel Energi

Kolom `koefisien` sangat penting karena tidak semua reaksi memiliki satu reaktan dan satu produk dengan koefisien 1. Pada dimerisasi, energi monomer harus dikalikan 2. Pada hidrasi formaldehida, ada dua reaktan, yaitu formaldehida dan air. Pada protonasi amonia, ada dua reaktan, yaitu NH_3 dan H^+ .

Contoh dimer air:



Dalam tabel input:

spesies	peran	koefisien
h2o_monomer	reaktan	2
h2o_dimer	produk	1

Perhitungan yang benar:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Jika koefisien tidak digunakan, kode dapat menghitung:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - E_{\text{monomer}}$$

Perhitungan tersebut salah karena mengabaikan bahwa dimer terbentuk dari dua molekul air. Oleh karena itu, tabel energi harus selalu memuat koefisien.

5. Validasi Tabel Energi Reaktan dan Produk

Sebelum tabel energi digunakan untuk menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , tabel harus divalidasi. Validasi bertujuan memastikan bahwa data yang masuk ke Python benar secara struktur dan makna.

Daftar validasi:

- [] Semua sistem memiliki reaktan dan produk.
- [] Peran hanya berisi reaktan atau produk.
- [] Koefisien stoikiometri benar.
- [] Kondisi ditulis konsisten, misalnya gas atau pelarut.
- [] Energi elektronik tersedia.
- [] Entalpi tersedia jika ΔH akan dihitung.
- [] Gibbs tersedia jika ΔG akan dihitung.
- [] Semua energi dalam satuan Hartree.
- [] Data berasal dari output yang sudah valid.
- [] Metode dan basis set konsisten untuk setiap sistem.

Python dapat memeriksa struktur data, tetapi tidak selalu dapat mengetahui apakah angka energi berasal dari output yang benar. Karena itu, validasi ilmiah tetap menjadi tanggung jawab mahasiswa.

6. Output 2: Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG

Output kedua adalah **tabel ΔE , ΔH , dan ΔG** . Tabel ini merupakan hasil utama Praktikum 7 karena memuat perubahan energi elektronik, perubahan entalpi, dan perubahan energi bebas Gibbs untuk setiap sistem reaksi.

Nama file yang dianjurkan:

tabel_delta_E_H_G.csv

Kolom yang dianjurkan:

Kolom	Fungsi
sistem	Nama sistem reaksi
kondisi	Gas atau pelarut
E_reaktan_Hartree	Total energi elektronik reaktan
E_produk_Hartree	Total energi elektronik produk
Delta_E_Hartree	Selisih energi elektronik dalam Hartree
Delta_E_kJmol	Selisih energi elektronik dalam kJ/mol
H_reaktan_Hartree	Total entalpi reaktan
H_produk_Hartree	Total entalpi produk
Delta_H_Hartree	Selisih entalpi dalam Hartree
Delta_H_kJmol	Selisih entalpi dalam kJ/mol
G_reaktan_Hartree	Total Gibbs reaktan

G_produk_Hartree	Total Gibbs produk
Delta_G_Hartree	Selisih Gibbs dalam Hartree
Delta_G_kJmol	Selisih Gibbs dalam kJ/mol
interpretasi_Delta_G	Ringkasan interpretasi termodinamika

Tabel ini harus menjadi rujukan utama dalam laporan. Jika laporan menyatakan bahwa suatu reaksi menguntungkan secara termodinamika, nilai `Delta_G_kJmol` harus mendukung pernyataan tersebut.

7. Makna ΔE dalam Output

ΔE adalah selisih energi elektronik antara produk dan reaktan.

Rumus:

$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

Interpretasi:

$$\Delta E < 0$$

→ produk lebih rendah energi elektroniknya daripada reaktan

$$\Delta E > 0$$

→ produk lebih tinggi energi elektroniknya daripada reaktan

Namun, ΔE tidak boleh langsung disamakan dengan spontanitas reaksi. ΔE tidak memasukkan kontribusi entropi secara eksplisit. Untuk penilaian termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu, ΔG lebih relevan.

Contoh analisis:

Nilai ΔE dimer air negatif menunjukkan bahwa dimer lebih stabil secara energi elektronik dibanding dua monomer terpisah. Hal ini dapat dikaitkan dengan terbentuknya ikatan hidrogen. Namun, untuk menilai kecenderungan termodinamika, nilai ΔG tetap harus diperiksa karena dimerisasi menurunkan entropi translasi.

Analisis ini menunjukkan bahwa ΔE penting, tetapi belum lengkap.

8. Makna ΔH dalam Output

ΔH adalah perubahan entalpi reaksi. Dalam output komputasi, entalpi biasanya mencakup energi elektronik ditambah koreksi termal dari translasi, rotasi, vibrasi, dan kontribusi terkait.

Rumus:

$$\Delta H = \Sigma H_{\text{produk}} - \Sigma H_{\text{reaktan}}$$

Interpretasi:

$$\Delta H < 0$$

→ proses menguntungkan secara entalpi

$$\Delta H > 0$$

→ proses tidak menguntungkan secara entalpi

ΔH berguna untuk memahami apakah pembentukan produk disertai penurunan entalpi. Pada dimer air dan dimer asam asetat, ΔH dapat negatif karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, ΔH belum mencakup kontribusi entropi dalam bentuk $-T\Delta S$.

Contoh analisis:

Nilai ΔH dimerisasi asam asetat yang negatif menunjukkan bahwa pembentukan dimer menguntungkan secara entalpi, terutama karena terbentuk dua ikatan hidrogen. Akan tetapi, nilai ΔG perlu dianalisis untuk melihat apakah keuntungan entalpi tersebut cukup besar untuk mengatasi penalti entropi akibat asosiasi dua monomer.

9. Makna ΔG dalam Output

ΔG adalah perubahan energi bebas Gibbs. Besaran ini digunakan untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan yang digunakan dalam perhitungan.

Rumus:

$$\Delta G = \Sigma G_{\text{produk}} - \Sigma G_{\text{reaktan}}$$

Interpretasi umum:

$$\Delta G < 0$$

→ produk lebih menguntungkan secara termodinamika

$$\Delta G > 0$$

→ reaktan lebih menguntungkan secara termodinamika

$$\Delta G \approx 0$$

→ sistem dekat kesetimbangan

ΔG sangat penting karena memasukkan kontribusi entalpi dan entropi. Reaksi dengan ΔE atau ΔH negatif dapat memiliki ΔG positif jika entropi tidak mendukung. Hal ini sering terjadi pada reaksi asosiasi atau dimerisasi.

Contoh analisis:

Jika ΔH dimerisasi air negatif tetapi ΔG mendekati nol atau positif, maka pembentukan ikatan hidrogen memang menstabilkan dimer secara entalpi, tetapi penurunan entropi akibat penggabungan dua molekul bebas menjadi satu kompleks membuat proses kurang menguntungkan secara energi bebas Gibbs.

Analisis seperti ini menunjukkan pemahaman bahwa termodinamika tidak hanya ditentukan oleh energi elektronik.

10. Perbandingan ΔE , ΔH , dan ΔG dalam Satu Tabel

Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG harus dibaca secara komparatif. Ketiga nilai tersebut tidak selalu sama dan tidak selalu memiliki tanda yang sama.

Contoh format interpretasi:

Sistem	ΔE	ΔH	ΔG	Makna
cis-trans 2-butena	negatif	negatif	negatif	Produk lebih stabil
dimer air	negatif	negatif	mungkin kurang negatif	Entropi menahan dimerisasi
hidrasi formaldehida	bervariasi	bervariasi	dipengaruhi entropi dan pelarut	Perlu analisis kritis
protonasi amonia	bervariasi	bervariasi	sangat dipengaruhi pelarut	Ion distabilkan pelarut

Tabel ini membantu mahasiswa melihat bahwa ΔE , ΔH , dan ΔG memberikan lapisan informasi berbeda.

Pernyataan laporan yang baik:

Perbedaan antara ΔE , ΔH , dan ΔG menunjukkan bahwa energi elektronik tidak cukup untuk menyimpulkan kecenderungan termodinamika. ΔH memasukkan koreksi termal, sedangkan ΔG memasukkan kontribusi entropi. Oleh karena itu, analisis akhir kestabilan termodinamika lebih tepat didasarkan pada ΔG .

11. Output 3: Diagram Energi Reaksi

Output ketiga adalah **diagram energi reaksi**. Diagram ini menyajikan energi relatif reaktan dan produk secara visual. Dalam Praktikum 7, diagram energi yang dibuat adalah diagram termodinamika sederhana, bukan diagram mekanisme reaksi lengkap.

Nama file diagram dapat berupa:

diagram_energi_gibbs_cis_trans_2butena_gas.png
 diagram_energi_gibbs_dimer_air_gas.png
 diagram_energi_gibbs_protonasi_amonia_pelarut.png

Format dasar diagram:

Reaktan = 0 kJ/mol

Produk = ΔG kJ/mol

Jika produk berada di bawah reaktan, maka ΔG negatif. Jika produk berada di atas reaktan, maka ΔG positif.

Diagram energi membantu mahasiswa membaca hasil secara cepat. Misalnya, jika pada diagram cis-trans 2-butena produk trans berada lebih rendah daripada reaktan cis, maka trans lebih stabil secara Gibbs pada tingkat teori yang digunakan.

12. Diagram Energi Reaksi sebagai Visualisasi Termodinamika

Diagram energi reaksi berfungsi untuk memperjelas hubungan antara angka dan makna kimia. Tabel ΔG memberikan nilai numerik, sedangkan diagram energi menunjukkan posisi relatif reaktan dan produk.

Contoh interpretasi diagram:

Diagram energi Gibbs menunjukkan bahwa produk berada lebih rendah daripada reaktan. Hal ini sesuai dengan nilai ΔG negatif dan menunjukkan bahwa produk lebih menguntungkan secara termodinamika pada kondisi perhitungan.

Untuk dimerisasi:

Diagram energi dimerisasi menunjukkan apakah dimer lebih rendah atau lebih tinggi secara Gibbs dibanding dua monomer. Jika dimer berada lebih tinggi, maka meskipun interaksi ikatan hidrogen dapat menguntungkan secara entalpi, asosiasi tidak menguntungkan secara energi bebas Gibbs pada kondisi yang dihitung.

Diagram membantu mahasiswa melihat perbedaan antara sistem isomerisasi dan dimerisasi. Pada isomerisasi, jumlah partikel tidak berubah. Pada dimerisasi, jumlah partikel berubah sehingga entropi memiliki pengaruh lebih besar.

13. Batasan Diagram Energi Reaksi

Diagram energi pada Praktikum 7 memiliki batasan penting. Diagram ini bukan diagram mekanisme reaksi. Diagram ini tidak menunjukkan keadaan transisi, jalur reaksi, atau energi aktivasi.

Diagram ini menjawab pertanyaan:

Apakah produk lebih stabil secara energi bebas Gibbs daripada reaktan?

Diagram ini tidak menjawab pertanyaan:

Bagaimana mekanisme reaksi berlangsung?
 Berapa energi aktivasi reaksi?
 Apakah reaksi berlangsung cepat atau lambat?
 Apa struktur keadaan transisi?

Untuk menjawab pertanyaan kinetika, diperlukan perhitungan keadaan transisi, jalur reaksi, atau intrinsic reaction coordinate. Praktikum 7 berfokus pada termodinamika reaksi, bukan kinetika.

Pernyataan yang baik dalam laporan:

Diagram energi pada praktikum ini menunjukkan perbedaan energi Gibbs antara reaktan dan produk. Diagram ini digunakan untuk analisis termodinamika, bukan untuk menyimpulkan energi aktivasi atau mekanisme reaksi.

14. Output 4: Grafik Perbandingan Fase Gas dan Pelarut

Output keempat adalah **grafik perbandingan fase gas dan pelarut**. Grafik ini digunakan untuk melihat pengaruh pelarut terhadap nilai energi reaksi, terutama ΔG .

Nama file yang dianjurkan:

grafik_perbandingan_gas_pelarut.png

Grafik ini dapat menampilkan ΔG_{gas} dan $\Delta G_{\text{pelarut}}$ untuk sistem yang memiliki data kedua kondisi. Jika data tersedia, tabel perbandingan juga disimpan sebagai:

perbandingan_fase_gas_pelarut.csv

Kolom yang dapat dimuat:

sistem	Delta_G_kJmol_gas	Delta_G_kJmol_pelarut	DeltaDelta_G_pelarut_minus_gas_kJmol
protonasi_amon ia	...	...	...
hidrasi_formald ehida	...	...	...
dimer_air	...	...	...
asam_asetat_di mer	...	...	...

Nilai $\Delta\Delta G_{\text{pelarut\_minus\_gas\_kJmol}}$ menunjukkan perubahan ΔG akibat pelarut:

$$\Delta\Delta G = \Delta G_{\text{pelarut}} - \Delta G_{\text{gas}}$$

Jika $\Delta\Delta G$ negatif, pelarut membuat reaksi lebih menguntungkan secara Gibbs dibanding fase gas.
 Jika $\Delta\Delta G$ positif, pelarut membuat reaksi kurang menguntungkan.

15. Makna Perbandingan Fase Gas dan Pelarut

Perbandingan fase gas dan pelarut penting karena banyak reaksi kimia nyata berlangsung dalam larutan. Fase gas adalah model tanpa pelarut. Model pelarut kontinu mencoba memasukkan pengaruh lingkungan melalui medium dielektrik.

Secara konseptual:

fase gas

→ molekul dihitung tanpa lingkungan pelarut

fase pelarut

→ molekul dihitung dalam medium pelarut

perbedaan hasil

→ menunjukkan pengaruh pelarut terhadap kestabilan relatif

Sistem yang paling sensitif terhadap pelarut biasanya melibatkan spesies bermuatan atau sangat polar. Protonasi amonia adalah contoh penting. NH_4^+ sebagai ion positif dapat distabilkan oleh pelarut polar. Karena itu, ΔG protonasi dalam pelarut dapat berbeda dari fase gas.

Contoh interpretasi:

Grafik perbandingan fase gas dan pelarut menunjukkan bahwa ΔG protonasi amonia lebih rendah dalam pelarut. Hal ini menunjukkan bahwa pelarut polar menstabilkan spesies bermuatan, terutama NH_4^+ . Namun, hasil ini tetap harus ditafsirkan dengan hati-hati karena proton bebas merupakan model ideal dan dalam larutan nyata proton biasanya tersolvasi.

Pernyataan tersebut menunjukkan bahwa mahasiswa tidak hanya membaca grafik, tetapi juga memahami keterbatasan model.

16. Pelarut Tidak Selalu Menstabilkan Produk

Kesalahan umum adalah menganggap pelarut selalu menstabilkan produk. Sebenarnya, pelarut dapat menstabilkan reaktan, produk, atau keduanya. Yang menentukan perubahan ΔG adalah stabilisasi relatif.

Secara konseptual:

jika pelarut menstabilkan produk lebih besar daripada reaktan

→ ΔG menjadi lebih negatif

jika pelarut menstabilkan reaktan lebih besar daripada produk

→ ΔG menjadi lebih positif

jika pelarut menstabilkan keduanya hampir sama

→ ΔG tidak banyak berubah

Pada dimerisasi, pelarut dapat memiliki efek yang kompleks. Pelarut polar dapat menstabilkan monomer melalui interaksi elektrostatik atau ikatan hidrogen. Jika monomer lebih distabilkan daripada dimer, maka dimerisasi dapat menjadi kurang menguntungkan dalam pelarut. Model pelarut kontinu dapat menangkap sebagian efek elektrostatik, tetapi tidak selalu menggambarkan ikatan hidrogen spesifik.

Contoh analisis:

Perubahan ΔG dalam pelarut harus ditafsirkan sebagai hasil stabilisasi relatif reaktan dan produk. Pelarut tidak otomatis menstabilkan produk. Pada sistem dimerisasi, pelarut dapat menstabilkan monomer dan mengurangi kecenderungan pembentukan dimer.

17. Output 5: File CSV Hasil Analisis

Output kelima adalah **file CSV hasil analisis**. CSV sangat penting karena menyimpan data numerik dalam bentuk yang dapat dibaca ulang oleh Python, spreadsheet, atau software analisis lain. CSV juga menjadi bukti bahwa diagram dan kesimpulan berasal dari data tertentu.

File CSV utama:

tabel_energi_reaktan_produk.csv
 tabel_delta_E_H_G.csv
 perbandingan_fase_gas_pelarut.csv

Fungsi masing-masing file:

File CSV	Fungsi
tabel_energi_reaktan_produk.csv	Menyimpan data energi setiap spesies
tabel_delta_E_H_G.csv	Menyimpan hasil ΔE , ΔH , dan ΔG
perbandingan_fase_gas_pelarut.csv	Menyimpan perbandingan gas dan pelarut

CSV harus disimpan tanpa mengubah format kolom secara sembarangan. Jika kolom berubah, kode Python lanjutan dapat gagal membaca data. Karena itu, penamaan kolom harus konsisten.

18. Hubungan CSV dengan Laporan Praktikum

CSV adalah jembatan antara output komputasi dan laporan. Tabel dalam laporan dapat diambil dari CSV. Grafik dalam laporan juga harus sesuai dengan CSV. Jika laporan menyebut nilai ΔG , nilai tersebut harus dapat ditemukan dalam `tabel_delta_E_H_G.csv`.

Alur hubungan:

```
output ChemCompute/software
→ data_energi_reaktan_produk.csv
→ praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py
→ tabel_delta_E_H_G.csv
→ diagram energi
→ laporan praktikum
```

Jika laporan tidak sesuai dengan CSV, maka ada masalah integritas data. Misalnya, laporan menyatakan ΔG negatif tetapi CSV menunjukkan ΔG positif. Dalam kasus seperti itu, mahasiswa harus memeriksa apakah ada kesalahan input, kesalahan tanda, kesalahan peran reaktan-produk, atau kesalahan interpretasi.

19. Output untuk Sistem cis-trans 2-butena

Untuk sistem isomerisasi cis-trans 2-butena, output utama adalah tabel dan diagram energi yang membandingkan cis dan trans.

Rumus:

cis-2-butena → trans-2-butena

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

$$\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$$

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

Output yang diharapkan:

Output	Fungsi
Tabel energi cis dan trans	Data dasar
Tabel ΔE , ΔH , ΔG	Selisih energi
Diagram energi	Visualisasi kestabilan relatif
CSV	Bukti data

Contoh interpretasi:

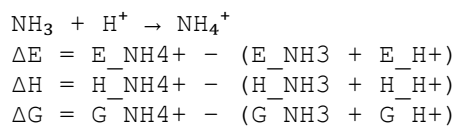
Jika ΔG bernilai negatif, maka trans-2-butena lebih stabil secara termodinamika daripada cis-2-butena. Perbedaan ini dapat dijelaskan oleh tolakan sterik yang lebih kecil pada isomer trans.

Sistem ini melatih mahasiswa membaca kestabilan isomer dari output energi.

20. Output untuk Protonasi Amonia

Untuk protonasi amonia, output harus memuat perbandingan energi NH_3 , H^+ , dan NH_4^+ .

Rumus:



Jika data gas dan pelarut tersedia, output tambahan adalah grafik perbandingan ΔG_{gas} dan $\Delta G_{\text{pelarut}}$.

Contoh interpretasi:

Jika ΔG protonasi lebih rendah dalam pelarut daripada fase gas, hal ini menunjukkan bahwa pelarut polar menstabilkan spesies bermuatan. NH_4^+ sebagai ion positif dapat mengalami stabilisasi elektrostatik oleh medium pelarut.

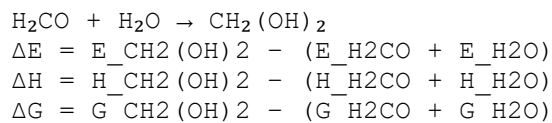
Catatan kritis harus tetap ditulis:

H^+ adalah model ideal; dalam larutan nyata proton biasanya tersolvasi. Karena itu, hasil protonasi amonia harus ditafsirkan sebagai model konseptual.

21. Output untuk Hidrasi Formaldehida

Untuk hidrasi formaldehida, output membandingkan formaldehida dan air sebagai reaktan dengan metanadiol sebagai produk.

Rumus:



Output yang diharapkan:

1. Tabel energi H_2CO , H_2O , dan $\text{CH}_2(\text{OH})_2$.
2. Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG .
3. Diagram energi reaksi.
4. Perbandingan gas-pelarut jika tersedia.

Contoh interpretasi:

Hidrasi formaldehida mengubah gugus karbonil menjadi geminal diol. Jika ΔG kurang menguntungkan meskipun ΔE tampak menguntungkan, hal ini dapat disebabkan oleh kontribusi entropi karena dua molekul reaktan bergabung menjadi satu produk.

22. Output untuk Dimer Air

Untuk dimer air, output membandingkan dua molekul air bebas dengan satu dimer air.

Rumus:

$$\begin{aligned}
 2 \text{ H}_2\text{O} &\rightarrow (\text{H}_2\text{O})_2 \\
 \Delta E &= E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}} \\
 \Delta H &= H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}} \\
 \Delta G &= G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}
 \end{aligned}$$

Output yang baik harus memperlihatkan apakah dimerisasi menguntungkan secara energi elektronik, entalpi, dan Gibbs.

Contoh interpretasi:

Jika ΔE atau ΔH dimer air negatif, pembentukan dimer menguntungkan karena adanya ikatan hidrogen. Namun, jika ΔG kurang negatif atau positif, hal ini menunjukkan bahwa penurunan entropi akibat penggabungan dua molekul bebas menjadi satu kompleks mengurangi keuntungan termodinamika.

Sistem ini penting untuk menjelaskan perbedaan antara energi elektronik dan energi bebas Gibbs.

23. Output untuk Konformer Etanol

Untuk konformer etanol, output membandingkan energi relatif beberapa konformer. Jika hanya dua konformer digunakan:

$$\begin{aligned}
 \text{etanol\_A} &\rightarrow \text{etanol\_B} \\
 \Delta E &= E_{\text{B}} - E_{\text{A}} \\
 \Delta H &= H_{\text{B}} - H_{\text{A}} \\
 \Delta G &= G_{\text{B}} - G_{\text{A}}
 \end{aligned}$$

Jika lebih dari dua konformer digunakan, energi relatif dihitung terhadap konformer paling rendah.

Format tabel:

Konformer	E relatif	H relatif	G relatif	Interpretasi
Etanol A	0	0	0	Paling stabil
Etanol B	...	...	...	Lebih tinggi/rendah
Etanol C	...	...	...	Jika digunakan

Contoh interpretasi:

Konformer etanol dengan nilai G paling rendah dianggap paling stabil pada kondisi perhitungan. Karena selisih energi konformer dapat kecil, ketelitian metode, basis set, dan pembulatan angka sangat penting.

24. Output untuk Asam Asetat Monomer dan Dimer

Untuk asam asetat, output membandingkan dua monomer dengan satu dimer.

Rumus:

$$2 \text{ CH}_3\text{COOH} \rightarrow (\text{CH}_3\text{COOH})_2$$

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Output harus membantu mahasiswa memahami keseimbangan antara stabilisasi ikatan hidrogen dan penalti entropi.

Contoh interpretasi:

Dimer asam asetat dapat lebih stabil secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen. Namun, ΔG dimerisasi harus dianalisis secara terpisah karena pembentukan dimer mengurangi jumlah partikel bebas dan menurunkan entropi translasi.

Jika pelarut digunakan:

Perbandingan fase gas dan pelarut dapat menunjukkan apakah pelarut menstabilkan monomer atau dimer secara relatif lebih besar.

25. Validasi Output Kode

Setelah kode dijalankan, mahasiswa harus memvalidasi output. Validasi output memastikan bahwa hasil yang digunakan dalam laporan benar-benar sesuai dengan data input.

Daftar validasi output:

- [] tabel_energi_reaktan_produk.csv terbentuk.
- [] tabel_delta_E_H_G.csv terbentuk.
- [] perbandingan_fase_gas_pelarut.csv terbentuk jika data tersedia.
- [] Diagram energi reaksi terbentuk.
- [] Grafik perbandingan gas-pelarut terbentuk jika data tersedia.
- [] Semua sistem muncul dalam tabel hasil.
- [] ΔE , ΔH , dan ΔG dihitung dengan tanda yang benar.
- [] Koefisien stoikiometri digunakan dengan benar.
- [] Hartree dikonversi ke kJ/mol dengan benar.

- [] Diagram energi sesuai dengan nilai ΔG .
- [] Grafik gas-pelarut sesuai dengan tabel perbandingan.
- [] Output sesuai dengan laporan praktikum.

Validasi ini penting karena kode yang berjalan tanpa error belum tentu menghasilkan output yang benar secara ilmiah. Misalnya, jika kolom peran tertukar antara reaktan dan produk, kode tetap dapat berjalan, tetapi tanda ΔG menjadi terbalik.

26. Kesalahan Umum pada Output Kode

Beberapa kesalahan umum dalam output kode Praktikum 7 adalah:

Kesalahan	Dampak
Tabel energi tidak memuat koefisien	Dimerisasi salah
Peran reaktan dan produk tertukar	Tanda ΔE , ΔH , ΔG terbalik
Energi absolut dikonversi setelah pembulatan kasar	Selisih energi tidak akurat
CSV tidak disimpan	Hasil sulit diverifikasi
Diagram tidak sesuai tabel	Visualisasi menyesatkan
Grafik gas-pelarut dibuat dari data tidak lengkap	Efek pelarut salah
H dan G kosong tetapi tetap dihitung	Output termodinamika tidak valid
Satuan tidak dicantumkan	Interpretasi energi membingungkan
Diagram dianggap diagram kinetika	Salah memahami energi aktivasi
Data latihan tidak diganti data aktual	Laporan tidak sah

Kesalahan-kesalahan ini harus dihindari. Output kode harus diperiksa sebelum dimasukkan ke laporan.

27. Analisis Kritis terhadap Output

Output Praktikum 7 harus dianalisis secara kritis. Mahasiswa tidak boleh hanya menampilkan tabel dan grafik tanpa penjelasan. Setiap output harus dikaitkan dengan konsep kimia.

Pertanyaan kritis yang harus diajukan:

1. Apakah produk lebih stabil berdasarkan ΔE ?
2. Apakah kesimpulan ΔE sama dengan ΔG ?
3. Jika berbeda, apakah entropi menjadi penyebab?
4. Apakah dimerisasi menguntungkan secara entalpi tetapi tidak secara Gibbs?
5. Apakah pelarut menstabilkan spesies bermuatan?
6. Apakah efek pelarut lebih besar pada sistem ionik daripada sistem netral?
7. Apakah hasil sesuai dengan teori kimia?
8. Apakah ada hasil yang mencurigakan dan perlu diperiksa ulang?

9. Apakah model pelarut kontinu cukup untuk menjelaskan sistem?
10. Apakah kesimpulan tidak melampaui data?

Contoh analisis kritis:

Nilai ΔH dimerisasi asam asetat menunjukkan stabilisasi entalpi akibat dua ikatan hidrogen. Namun, nilai ΔG tidak senegatif ΔH karena pembentukan dimer mengurangi entropi translasi. Dengan demikian, output menunjukkan bahwa dimerisasi harus dinilai dari keseimbangan antara keuntungan entalpi dan penalti entropi.

Analisis tersebut menunjukkan bahwa mahasiswa memahami makna output, bukan hanya membaca angka.

28. Kriteria Output yang Layak Masuk Laporan

Output yang dimasukkan ke laporan harus memenuhi kriteria berikut:

1. Data berasal dari output komputasi yang valid.
2. Struktur reaktan dan produk sudah dioptimasi.
3. Tidak ada frekuensi imajiner untuk struktur minimum.
4. Metode dan basis set konsisten.
5. Muatan dan multiplicity benar.
6. Satuan energi jelas.
7. Koefisien stoikiometri benar.
8. Tabel ΔE , ΔH , dan ΔG lengkap.
9. Diagram energi memiliki label sumbu dan satuan.
10. Grafik gas-pelarut jelas dan tidak menyesatkan.
11. CSV tersedia.
12. Interpretasi sesuai data.

Jika salah satu syarat penting tidak terpenuhi, output sebaiknya tidak langsung digunakan. Mahasiswa harus memperbaiki data atau memberi catatan keterbatasan.

29. Contoh Narasi Output untuk Laporan

Mahasiswa dapat menulis narasi umum output sebagai berikut:

Kode `praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py` menghasilkan tabel energi reaktan dan produk, tabel ΔE , ΔH , dan ΔG , diagram energi reaksi, grafik perbandingan fase gas dan pelarut, serta file CSV hasil analisis. Energi dari output komputasi dimasukkan dalam satuan Hartree, kemudian selisih energi dikonversi ke kJ/mol. Nilai ΔG digunakan sebagai dasar utama untuk membahas

kecenderungan termodinamika, sedangkan ΔE dan ΔH digunakan untuk memahami kontribusi energi elektronik dan entalpi.

Contoh narasi untuk efek pelarut:

Grafik perbandingan fase gas dan pelarut menunjukkan perubahan ΔG setelah model pelarut diterapkan. Perubahan tersebut ditafsirkan sebagai akibat stabilisasi relatif reaktan dan produk oleh pelarut. Sistem yang melibatkan spesies bermuatan, seperti protonasi amonia, menunjukkan sensitivitas lebih besar terhadap pelarut dibanding sistem netral.

Contoh narasi untuk dimerisasi:

Pada sistem dimer air dan dimer asam asetat, output menunjukkan pentingnya membedakan ΔH dan ΔG . Pembentukan ikatan hidrogen dapat menurunkan entalpi, tetapi penggabungan dua molekul menjadi satu kompleks menyebabkan penurunan entropi sehingga ΔG dapat menjadi kurang menguntungkan.

30. Implikasi Pedagogis Output Kode

Output kode Praktikum 7 memiliki implikasi pedagogis yang penting. Pertama, mahasiswa belajar bahwa perhitungan energi reaksi harus disusun dari data reaktan dan produk yang jelas. Kedua, mahasiswa belajar bahwa stoikiometri harus masuk dalam perhitungan energi. Ketiga, mahasiswa belajar membedakan energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs. Keempat, mahasiswa belajar bahwa pelarut dapat mengubah kestabilan relatif. Kelima, mahasiswa belajar bahwa tabel dan grafik harus dapat diverifikasi melalui file CSV.

Secara pedagogis, output kode membangun alur berpikir:

```
data energi
→ perhitungan selisih
→ konversi satuan
→ visualisasi
→ interpretasi
→ kesimpulan ilmiah
```

Dengan output ini, mahasiswa tidak hanya menjadi pengguna software, tetapi juga analis data komputasi. Mereka belajar menyusun data, menghitung, memeriksa, memvisualisasikan, dan menafsirkan hasil secara bertanggung jawab.

31. Transisi ke Analisis

Subbab 10.8 telah membahas output kode dari file

`praktikum_07_energi_reaksi_termodinamika.py`. Output yang dihasilkan meliputi tabel energi reaktan dan produk, tabel ΔE , ΔH , dan ΔG , diagram energi reaksi, grafik perbandingan fase gas dan pelarut, serta file CSV hasil analisis. Output-output tersebut menjadi dasar untuk

memahami kestabilan relatif, kecenderungan termodinamika, peran entalpi dan entropi, serta efek pelarut.

Subbab berikutnya akan membahas analisis. Pada subbab 10.9, mahasiswa akan membedakan energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs serta menjelaskan peran pelarut dalam menstabilkan spesies polar atau bermuatan. Dengan demikian, subbab 10.9 akan mengubah output numerik dan visual dari subbab ini menjadi penjelasan kimia yang lebih mendalam.

10.9 Analisis

Analisis dalam Praktikum 7 diarahkan untuk membedakan **energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs**, serta menjelaskan **peran pelarut dalam menstabilkan spesies polar atau bermuatan**. Setelah mahasiswa memperoleh tabel energi reaktan dan produk, tabel ΔE , ΔH , dan ΔG , diagram energi reaksi, grafik perbandingan fase gas dan pelarut, serta file CSV hasil analisis, tahap berikutnya adalah menafsirkan angka-angka tersebut secara kimiawi.

Analisis tidak boleh berhenti pada pernyataan bahwa “produk lebih stabil” atau “nilai ΔG negatif”. Mahasiswa harus menjelaskan **mengapa** nilai tersebut muncul, **apa perbedaan makna** antara ΔE , ΔH , dan ΔG , **bagaimana entropi memengaruhi kesimpulan**, dan **mengapa pelarut dapat mengubah kestabilan relatif suatu spesies**. Dengan demikian, subbab ini menekankan bahwa output termodinamika komputasi harus dibaca sebagai data ilmiah yang membutuhkan penalaran, bukan sekadar angka akhir dari software.

Secara umum, analisis Praktikum 7 dapat diringkas dalam alur berikut:

```
energi elektronik
→ koreksi termal
→ entalpi
→ entropi
→ energi bebas Gibbs
→ kestabilan relatif
→ efek pelarut
→ kesimpulan termodinamika
```

Alur tersebut menunjukkan bahwa analisis energi reaksi tidak bersifat satu lapis. Energi elektronik menjelaskan kestabilan berdasarkan struktur elektronik. Entalpi memasukkan koreksi termal. Energi bebas Gibbs memasukkan kontribusi entropi dan menjadi kriteria utama untuk kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu. Efek pelarut kemudian memperluas analisis dari molekul terisolasi menuju sistem yang lebih dekat dengan kondisi kimia nyata.

1. Pengertian Analisis Termodinamika Komputasi

Analisis termodinamika komputasi adalah proses menafsirkan data energi hasil perhitungan kimia kuantum untuk menjelaskan kestabilan relatif, kecenderungan reaksi, dan pengaruh lingkungan

terhadap sistem kimia. Dalam Praktikum 7, analisis dilakukan terhadap sistem model seperti isomerisasi cis-trans 2-butena, protonasi amonia, hidrasi formaldehida, dimer air, konformer etanol, serta asam asetat monomer dan dimer.

Analisis ini bertumpu pada tiga besaran utama:

1. ΔE
2. ΔH
3. ΔG

Ketiganya sama-sama berbentuk perubahan energi, tetapi maknanya berbeda. ΔE menjelaskan perubahan energi elektronik. ΔH menjelaskan perubahan entalpi. ΔG menjelaskan perubahan energi bebas Gibbs. Jika mahasiswa menyamakan ketiganya, maka analisis menjadi keliru.

Dalam laporan Praktikum 7, mahasiswa harus dapat menjawab pertanyaan berikut:

1. Apakah produk lebih rendah energi elektroniknya daripada reaktan?
2. Apakah proses menguntungkan secara entalpi?
3. Apakah proses menguntungkan secara energi bebas Gibbs?
4. Apakah ΔE , ΔH , dan ΔG memberikan kesimpulan yang sama?
5. Jika berbeda, apakah perbedaan tersebut dapat dijelaskan oleh entropi?
6. Apakah pelarut menstabilkan produk lebih besar daripada reaktan?
7. Apakah spesies bermuatan lebih sensitif terhadap pelarut?
8. Apakah hasil komputasi sesuai dengan teori kimia?
9. Apakah ada keterbatasan model yang perlu disebutkan?

Dengan menjawab pertanyaan-pertanyaan tersebut, mahasiswa dapat menyusun analisis yang argumentatif dan tidak sekadar deskriptif.

2. Latar Historis Analisis Energi Reaksi

Secara historis, konsep energi reaksi berkembang dari termodinamika klasik. Termodinamika memperkenalkan besaran seperti energi internal, entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs untuk menjelaskan arah kecenderungan proses kimia. Gibbs merumuskan energi bebas sebagai kriteria kespontanan pada suhu dan tekanan tetap. Dalam kerangka ini, suatu proses secara termodinamika menguntungkan jika energi bebas Gibbs menurun.

Perkembangan mekanika statistik kemudian memberikan dasar molekuler bagi termodinamika. Entropi tidak lagi hanya dipandang sebagai ukuran ketidakteraturan secara umum, tetapi dikaitkan dengan jumlah keadaan mikro yang dapat diakses oleh sistem. Kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan elektronik dapat dihitung dari fungsi partisi. Pendekatan ini menjadi dasar termokimia molekuler.

Mekanika kuantum kemudian memungkinkan energi elektronik molekul dihitung dari struktur elektroniknya. Dalam kimia komputasi modern, energi elektronik diperoleh dari metode seperti Hartree-Fock, density functional theory, metode semiempiris, atau metode korelasi elektron. Perhitungan frekuensi vibrasi kemudian memberikan zero-point energy, koreksi entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs.

Dengan demikian, analisis Praktikum 7 merupakan sintesis dari tiga tradisi ilmiah:

termodinamika klasik

→ H , S , G , spontanitas

mekanika statistik

→ asal molekuler entropi dan koreksi termal

mekanika kuantum

→ energi elektronik dan struktur molekul

Literatur kimia fisik seperti Atkins, McQuarrie dan Simon, serta Levine membahas dasar termodinamika dan mekanika statistik. Literatur kimia komputasi seperti Jensen, Cramer, Leach, Lewars, dan Foresman-Frisch menjelaskan bagaimana energi, frekuensi, dan koreksi termokimia dihitung dalam praktik komputasi. Literatur model pelarut dari Tomasi, Mennucci, Cammi, Cramer, Truhlar, Klamt, dan Marenich memperluas analisis ke sistem larutan. Praktikum 7 mengambil gagasan utama dari tradisi tersebut dan menerapkannya pada sistem reaksi sederhana.

3. Energi Elektronik sebagai Lapisan Pertama Analisis

Energi elektronik adalah energi yang diperoleh dari perhitungan struktur elektronik molekul pada geometri tertentu. Dalam output software, energi elektronik biasanya ditampilkan sebagai `SCF Energy`, `Total Energy`, `Electronic Energy`, atau istilah sejenis. Energi ini sering dinyatakan dalam Hartree.

Dalam analisis reaksi, yang digunakan bukan nilai absolut energi elektronik, tetapi selisih energi antara produk dan reaktan:

$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

Jika ΔE negatif, produk lebih rendah energi elektroniknya daripada reaktan. Jika ΔE positif, produk lebih tinggi energi elektroniknya daripada reaktan.

Namun, ΔE hanya lapisan pertama analisis. Energi elektronik belum memasukkan kontribusi entropi secara lengkap. Energi elektronik juga belum sepenuhnya menggambarkan kondisi termodinamika pada suhu tertentu. Karena itu, ΔE berguna untuk melihat kecenderungan energi elektronik, tetapi tidak boleh langsung dianggap sebagai ukuran spontanitas.

Contoh pada cis-trans 2-butena:

cis-2-butena $\rightarrow$ trans-2-butena

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

Jika ΔE negatif, trans-2-butena lebih stabil secara energi elektronik. Penjelasannya adalah gugus metil pada trans-2-butena lebih berjauhan sehingga tolakan sterik lebih kecil dibanding pada cis-2-butena.

Contoh analisis yang baik:

Nilai ΔE isomerisasi cis-2-butena menjadi trans-2-butena bernilai negatif. Hal ini menunjukkan bahwa trans-2-butena memiliki energi elektronik lebih rendah daripada cis-2-butena pada tingkat teori yang digunakan. Secara struktur, kestabilan trans dapat dikaitkan dengan tolakan sterik yang lebih kecil antara dua gugus metil.

Analisis tersebut menghubungkan angka ΔE dengan struktur molekul, bukan hanya menyebut tanda negatif.

4. Keterbatasan Energi Elektronik

Energi elektronik memiliki keterbatasan. Pertama, energi elektronik sangat bergantung pada metode dan basis set. HF, DFT, dan metode lain dapat menghasilkan energi relatif yang berbeda. Kedua, energi elektronik tidak memasukkan kontribusi termal secara penuh. Ketiga, energi elektronik tidak memasukkan entropi translasi, rotasi, dan vibrasi dalam bentuk yang diperlukan untuk menilai ΔG . Keempat, energi elektronik fase gas tidak selalu mewakili kondisi larutan.

Karena itu, laporan yang hanya menyimpulkan berdasarkan ΔE belum lengkap.

Pernyataan yang kurang tepat:

Karena ΔE negatif, reaksi pasti spontan.

Pernyataan yang lebih tepat:

Nilai ΔE negatif menunjukkan bahwa produk lebih rendah energi elektroniknya daripada reaktan. Namun, untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu tertentu, nilai ΔG perlu dianalisis karena ΔG memasukkan kontribusi entalpi dan entropi.

Perbedaan ini penting. ΔE menjelaskan satu aspek kestabilan, sedangkan ΔG menjelaskan kecenderungan termodinamika yang lebih lengkap.

5. Entalpi sebagai Lapisan Kedua Analisis

Entalpi adalah besaran termodinamika yang berkaitan dengan panas reaksi pada tekanan tetap. Dalam komputasi molekul, entalpi biasanya diperoleh dari energi elektronik ditambah koreksi termal. Koreksi tersebut dapat mencakup kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan koreksi tekanan-volume dalam pendekatan gas ideal.

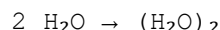
Rumus perubahan entalpi:

$$\Delta H = \sum H_{\text{produk}} - \sum H_{\text{reaktan}}$$

Jika ΔH negatif, proses menguntungkan secara entalpi. Jika ΔH positif, proses tidak menguntungkan secara entalpi.

Entalpi sangat penting untuk sistem yang melibatkan pembentukan atau pemutusan interaksi, seperti dimer air dan dimer asam asetat. Pada kedua sistem tersebut, pembentukan dimer dapat menguntungkan secara entalpi karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, entalpi belum menjelaskan seluruh kecenderungan termodinamika karena belum mempertimbangkan kontribusi entropi dalam bentuk $-T\Delta S$.

Contoh dimer air:



Jika ΔH negatif, pembentukan dimer menguntungkan secara entalpi karena adanya ikatan hidrogen. Namun, dua molekul air bebas berubah menjadi satu kompleks, sehingga entropi translasi menurun. Oleh karena itu, ΔG dapat kurang menguntungkan daripada ΔH .

Contoh analisis:

Nilai ΔH dimer air yang negatif menunjukkan bahwa pembentukan dimer menguntungkan secara entalpi. Keuntungan ini dapat dikaitkan dengan terbentuknya ikatan hidrogen antara dua molekul air. Namun, nilai ΔG perlu dianalisis secara terpisah karena proses dimerisasi mengurangi jumlah partikel bebas dan menurunkan entropi translasi.

6. Perbedaan ΔE dan ΔH

ΔE dan ΔH sering memiliki nilai yang tidak terlalu jauh, tetapi keduanya tidak identik. ΔE berasal dari energi elektronik, sedangkan ΔH memasukkan koreksi termal. Pada sistem tertentu, koreksi termal dapat mengubah besarnya nilai, bahkan dalam kasus energi relatif kecil dapat memengaruhi kesimpulan.

Perbandingan konseptual:

Besaran	Makna	Kontribusi Utama
ΔE	Perubahan energi elektronik	Struktur elektronik
ΔH	Perubahan entalpi	Energi elektronik + koreksi termal
ΔG	Perubahan energi bebas Gibbs	Entalpi – kontribusi entropi

Jika mahasiswa menemukan bahwa ΔE dan ΔH berbeda, perbedaan itu tidak perlu dianggap sebagai kesalahan. Perbedaan tersebut justru menunjukkan bahwa koreksi termal berperan.

Contoh analisis:

Nilai ΔH sedikit berbeda dari ΔE karena ΔH memasukkan koreksi termal yang tidak terdapat pada energi elektronik murni. Oleh karena itu, perbedaan antara ΔE dan ΔH menunjukkan adanya kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan koreksi termodinamika lain dalam output frekuensi.

7. Energi Bebas Gibbs sebagai Kriteria Termodinamika

Energi bebas Gibbs adalah besaran yang paling penting untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan tetap. Rumus dasarnya adalah:

$$G = H - TS$$

Untuk reaksi:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Jika ΔG negatif, produk lebih menguntungkan secara termodinamika pada kondisi yang digunakan. Jika ΔG positif, reaktan lebih menguntungkan. Jika ΔG mendekati nol, sistem berada dekat kesetimbangan.

Interpretasi umum:

$$\Delta G < 0$$

→ proses menguntungkan secara termodinamika

$$\Delta G > 0$$

→ proses tidak menguntungkan secara termodinamika

$$\Delta G \approx 0$$

→ sistem dekat kesetimbangan

Namun, ΔG bukan ukuran laju reaksi. Reaksi dengan ΔG negatif dapat berjalan lambat jika memiliki energi aktivasi tinggi. Praktikum 7 membahas termodinamika, bukan kinetika. Oleh karena itu, mahasiswa tidak boleh menyimpulkan bahwa reaksi “cepat” hanya karena ΔG negatif.

Pernyataan yang baik:

Nilai ΔG negatif menunjukkan bahwa produk lebih menguntungkan secara termodinamika pada kondisi perhitungan. Namun, nilai ini tidak memberikan informasi tentang laju reaksi atau energi aktivasi.

8. Peran Entropi dalam Perbedaan ΔH dan ΔG

Perbedaan antara ΔH dan ΔG berasal dari kontribusi entropi:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Jika ΔS negatif, maka $-T\Delta S$ bernilai positif, sehingga ΔG menjadi lebih besar daripada ΔH . Hal ini sering terjadi pada reaksi asosiasi, misalnya dimer air dan dimer asam asetat. Dua molekul bebas bergabung menjadi satu kompleks, sehingga jumlah keadaan translasi dan rotasi bebas berkurang.

Contoh dimerisasi:



Secara entalpi, pembentukan dimer dapat menguntungkan karena terbentuk ikatan hidrogen. Namun, secara entropi, sistem kehilangan kebebasan translasi karena dua partikel menjadi satu. Akibatnya, ΔG dapat kurang negatif dibanding ΔH .

Analisis konseptual:

pembentukan ikatan hidrogen
→ ΔH menjadi lebih negatif

penggabungan dua molekul menjadi satu kompleks
→ ΔS menjadi negatif

$-T\Delta S$ menjadi positif
→ ΔG menjadi kurang menguntungkan

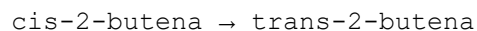
Contoh analisis laporan:

Nilai ΔH dimerisasi asam asetat menunjukkan keuntungan entalpi akibat pembentukan dua ikatan hidrogen. Namun, nilai ΔG tidak se-negatif ΔH karena proses dimerisasi mengurangi entropi translasi. Hal ini menunjukkan bahwa kecenderungan termodinamika ditentukan oleh keseimbangan antara keuntungan entalpi dan penalti entropi.

Analisis seperti ini menunjukkan pemahaman bahwa termodinamika bukan hanya persoalan “energi turun”, tetapi juga persoalan jumlah keadaan yang dapat diakses sistem.

9. Analisis Isomerisasi cis-trans 2-butena

Isomerisasi cis-trans 2-butena merupakan sistem yang relatif sederhana untuk membedakan kestabilan isomer. Reaksi konseptualnya:



Rumus analisis:

$$\Delta E = E_{\text{trans}} - E_{\text{cis}}$$

$$\Delta H = H_{\text{trans}} - H_{\text{cis}}$$

$$\Delta G = G_{\text{trans}} - G_{\text{cis}}$$

Jika nilai ΔG negatif, trans-2-butena lebih stabil secara termodinamika daripada cis-2-butena pada tingkat teori yang digunakan. Penjelasan kimianya berkaitan dengan tolakan sterik. Pada cis-2-butena, dua gugus metil berada pada sisi yang sama dari ikatan rangkap sehingga jaraknya lebih dekat. Pada trans-2-butena, dua gugus metil berada pada sisi berlawanan sehingga tolakan sterik lebih kecil.

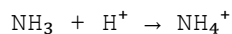
Analisis yang baik harus menghubungkan data dan struktur:

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa trans-2-butena memiliki nilai G lebih rendah daripada cis-2-butena. Nilai ΔG untuk perubahan cis menjadi trans bernilai negatif, sehingga trans lebih stabil secara termodinamika. Kestabilan ini dapat dijelaskan oleh berkurangnya tolakan sterik antara gugus metil pada isomer trans.

Namun, mahasiswa juga harus menyadari bahwa perhitungan ini tidak menjelaskan mekanisme isomerisasi. Ikatan rangkap $C=C$ tidak dapat berotasi bebas tanpa melemahkan atau memutus komponen π . Karena itu, analisis ini adalah analisis kestabilan isomer, bukan analisis energi aktivasi.

10. Analisis Protonasi Amonia

Protonasi amonia digunakan untuk mempelajari pembentukan spesies bermuatan dan efek pelarut. Reaksi modelnya:



Rumus analisis:

$$\Delta E = E_{\text{NH}_4^+} - (E_{\text{NH}_3} + E_{\text{H}^+})$$

$$\Delta H = H_{\text{NH}_4^+} - (H_{\text{NH}_3} + H_{\text{H}^+})$$

$$\Delta G = G_{\text{NH}_4^+} - (G_{\text{NH}_3} + G_{\text{H}^+})$$

Amonia memiliki pasangan elektron bebas pada atom nitrogen sehingga dapat menerima proton membentuk ion amonium. NH_4^+ bermuatan positif dan karena itu sangat sensitif terhadap lingkungan pelarut polar. Dalam pelarut polar, NH_4^+ dapat distabilkan melalui interaksi elektrostatis dengan medium pelarut.

Analisis utama pada sistem ini adalah membandingkan fase gas dan pelarut. Jika $\Delta G_{\text{pelarut}}$ lebih rendah daripada ΔG_{gas} , maka pelarut membuat protonasi lebih menguntungkan secara energi bebas. Namun, kesimpulan ini harus ditulis hati-hati karena H^+ adalah spesies ideal. Dalam larutan nyata, proton biasanya tersolvasi, misalnya sebagai H_3O^+ atau kluster terhidrasi lain.

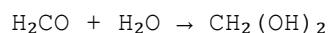
Contoh analisis:

Nilai ΔG protonasi amonia dalam pelarut lebih rendah dibanding fase gas. Hal ini menunjukkan bahwa pelarut polar menstabilkan spesies bermuatan, terutama NH_4^+ . Namun, reaksi ini harus dipahami sebagai model konseptual karena proton bebas tidak mewakili keadaan proton yang sebenarnya dalam larutan.

Analisis ini menunjukkan keseimbangan antara pemahaman kimia dan kehati-hatian metodologis.

11. Analisis Hidrasi Formaldehida

Hidrasi formaldehida melibatkan adisi air pada gugus karbonil:



Rumus analisis:

$$\Delta E = E_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (E_{\text{H}_2\text{CO}} + E_{\text{H}_2\text{O}})$$

$$\Delta H = H_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (H_{\text{H}_2\text{CO}} + H_{\text{H}_2\text{O}})$$

$$\Delta G = G_{\text{CH}_2(\text{OH})_2} - (G_{\text{H}_2\text{CO}} + G_{\text{H}_2\text{O}})$$

Sistem ini penting karena menghubungkan reaktivitas karbonil dengan termodinamika. Formaldehida memiliki ikatan $\text{C}=\text{O}$ yang polar. Atom karbon karbonil bersifat elektrofilik, sedangkan air dapat bertindak sebagai nukleofil lemah. Produk hidrasi adalah geminal diol.

Dalam analisis, mahasiswa harus memperhatikan bahwa dua molekul reaktan bergabung menjadi satu produk. Perubahan jumlah partikel ini dapat menurunkan entropi. Oleh karena itu, ΔG dapat berbeda dari ΔE atau ΔH .

Contoh analisis:

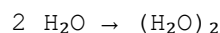
Hidrasi formaldehida mengubah gugus karbonil menjadi geminal diol. Jika ΔE menunjukkan produk lebih rendah secara energi elektronik tetapi ΔG kurang menguntungkan, perbedaan tersebut dapat dijelaskan oleh kontribusi entropi karena dua molekul reaktan bergabung menjadi satu produk. Selain itu, pelarut

dapat memengaruhi kestabilan relatif karena baik formaldehida, air, maupun metanadiol bersifat polar.

Analisis tersebut mengaitkan struktur karbonil, perubahan ikatan, entropi, dan pelarut.

12. Analisis Dimer Air

Dimer air merupakan model sederhana untuk mempelajari ikatan hidrogen:



Rumus analisis:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Jika ΔE negatif, dimer lebih rendah energi elektroniknya dibanding dua monomer terpisah. Hal ini dapat dijelaskan oleh terbentuknya ikatan hidrogen. Jika ΔH juga negatif, pembentukan dimer menguntungkan secara entalpi. Namun, ΔG dapat kurang negatif atau positif karena proses dimerisasi mengurangi entropi translasi.

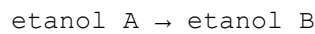
Analisis yang baik:

Pembentukan dimer air menunjukkan kompetisi antara stabilisasi entalpi dan penalti entropi. Ikatan hidrogen menurunkan energi dan membuat ΔH lebih menguntungkan, tetapi penggabungan dua molekul air menjadi satu kompleks mengurangi entropi translasi. Oleh karena itu, ΔG dimerisasi dapat berbeda secara signifikan dari ΔE dan ΔH .

Dimer air adalah contoh penting untuk menjelaskan mengapa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG .

13. Analisis Konformer Etanol

Konformer etanol digunakan untuk membandingkan kestabilan struktur yang berbeda akibat rotasi ikatan tunggal. Reaksi konseptualnya dapat ditulis:



Rumus analisis:

$$\Delta E = E_B - E_A$$

$$\Delta H = H_B - H_A$$

$$\Delta G = G_B - G_A$$

Jika lebih dari dua konformer digunakan, energi relatif dihitung terhadap konformer dengan nilai energi terendah.

Konformer etanol sering memiliki perbedaan energi kecil. Oleh karena itu, mahasiswa harus berhati-hati dalam pembulatan angka. Perbedaan 0,001 Hartree setara dengan sekitar 2,6 kJ/mol, sehingga digit desimal pada energi elektronik tidak boleh dibuang terlalu awal.

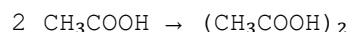
Contoh analisis:

Konformer etanol dengan nilai G paling rendah dianggap paling stabil pada tingkat teori yang digunakan. Karena perbedaan energi antarkonformer relatif kecil, kesimpulan kestabilan harus mempertimbangkan ketelitian metode, basis set, dan koreksi termal. Pelarut juga dapat mengubah urutan kestabilan jika salah satu konformer memiliki momen dipol atau kemampuan interaksi yang lebih besar.

Konformer etanol melatih mahasiswa memahami bahwa perubahan kecil pada orientasi molekul dapat memiliki konsekuensi energi.

14. Analisis Asam Asetat Monomer dan Dimer

Asam asetat dapat membentuk dimer melalui dua ikatan hidrogen:



Rumus analisis:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

$$\Delta H = H_{\text{dimer}} - 2H_{\text{monomer}}$$

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Dimer asam asetat biasanya sangat baik untuk menunjukkan stabilisasi ikatan hidrogen ganda. Secara entalpi, dimer dapat stabil karena dua ikatan hidrogen terbentuk secara siklik. Namun, secara entropi, dua monomer bebas menjadi satu dimer sehingga jumlah keadaan translasi menurun.

Analisis yang baik:

Dimerisasi asam asetat menguntungkan secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen antara dua gugus karboksilat. Namun, nilai ΔG harus dianalisis karena pembentukan satu dimer dari dua monomer menyebabkan penurunan entropi translasi. Jika pelarut polar digunakan, monomer dapat distabilkan oleh pelarut sehingga kecenderungan dimerisasi dapat berubah.

Sistem ini menunjukkan bahwa efek pelarut tidak selalu sederhana. Pelarut dapat menstabilkan dimer, tetapi juga dapat menstabilkan monomer dan mengurangi kecenderungan asosiasi.

15. Peran Pelarut dalam Menstabilkan Spesies Polar atau Bermuatan

Pelarut dapat menstabilkan spesies polar atau bermuatan melalui interaksi elektrostatik. Dalam model pelarut kontinu, pelarut dianggap sebagai medium dielektrik yang merespons distribusi muatan zat terlarut. Spesies bermuatan menghasilkan medan listrik yang kuat, sehingga respons pelarut dapat menurunkan energi relatif spesies tersebut.

Secara konseptual:

```
spesies bermuatan
→ medan listrik kuat
→ pelarut polar merespons
→ energi spesies turun
→ kestabilan meningkat
```

Spesies polar juga dapat distabilkan, tetapi biasanya efeknya tidak sebesar pada ion. Molekul netral nonpolar biasanya lebih sedikit dipengaruhi pelarut polar dibanding ion.

Urutan sensitivitas umum terhadap pelarut:

```
ion
→ sangat sensitif

molekul sangat polar
→ cukup sensitif

molekul nonpolar
→ relatif kurang sensitif
```

Contoh:

1. NH_4^+ dalam protonasi amonia sangat dipengaruhi pelarut.
2. Formaldehida dan metanadiol dipengaruhi pelarut karena polar.
3. 2-butena relatif kurang dipengaruhi pelarut karena bersifat netral dan kurang polar.
4. Dimer asam asetat dipengaruhi pelarut karena melibatkan ikatan hidrogen dan gugus karboksilat.

16. Model Pelarut Kontinu dalam Analisis

Model pelarut kontinu, seperti PCM, CPCM, COSMO, atau SMD, digunakan untuk memperkirakan pengaruh pelarut tanpa memasukkan molekul pelarut satu per satu. Dalam model ini, zat terlarut ditempatkan dalam rongga dan pelarut digambarkan sebagai medium kontinu dengan konstanta dielektrik tertentu.

Secara konseptual:

```
zat terlarut
```

→ berada dalam rongga

pelarut

→ medium kontinu

muatan zat terlarut

→ mempolarisasi medium

medium

→ menstabilkan zat terlarut

Model ini sangat praktis untuk pembelajaran karena biaya komputasi relatif lebih rendah dibanding pelarut eksplisit. Namun, model pelarut kontinu memiliki keterbatasan. Ia tidak menggambarkan posisi molekul pelarut secara spesifik, tidak memodelkan jaringan ikatan hidrogen secara eksplisit, dan tidak menangkap dinamika pelarut secara penuh.

Pernyataan analisis kritis:

Model pelarut kontinu dapat menjelaskan stabilisasi elektrostatik spesies polar atau bermuatan, tetapi tidak selalu menggambarkan interaksi spesifik seperti ikatan hidrogen langsung antara pelarut dan zat terlarut. Oleh karena itu, hasil pelarut kontinu harus ditafsirkan sebagai pendekatan.

17. Pelarut Tidak Selalu Menstabilkan Produk

Dalam analisis efek pelarut, mahasiswa harus menghindari anggapan bahwa pelarut selalu menstabilkan produk. Pelarut dapat menstabilkan reaktan, produk, atau keduanya. Yang menentukan perubahan ΔG adalah stabilisasi relatif.

Secara konseptual:

jika pelarut menstabilkan produk lebih besar daripada reaktan
→ ΔG menjadi lebih negatif

jika pelarut menstabilkan reaktan lebih besar daripada produk
→ ΔG menjadi lebih positif

jika pelarut menstabilkan reaktan dan produk hampir sama
→ ΔG tidak banyak berubah

Contoh pada protonasi amonia, pelarut polar dapat menstabilkan NH_4^+ lebih besar daripada NH_3 , sehingga protonasi menjadi lebih menguntungkan. Namun, pada dimerisasi asam asetat, pelarut polar dapat menstabilkan monomer asam asetat melalui interaksi dengan gugus karboksilat, sehingga pembentukan dimer dapat menjadi kurang menguntungkan dibanding fase gas.

Analisis yang baik:

Perubahan ΔG dalam pelarut harus dibaca sebagai akibat stabilisasi relatif antara reaktan dan produk. Pelarut tidak selalu menstabilkan produk. Pada sistem

dimerisasi, pelarut dapat menstabilkan monomer sehingga kecenderungan pembentukan dimer berkurang.

18. Analisis Perbandingan Fase Gas dan Pelarut

Perbandingan fase gas dan pelarut dilakukan dengan membandingkan ΔG_{gas} dan $\Delta G_{\text{pelarut}}$.

Rumus:

$$\Delta\Delta G = \Delta G_{\text{pelarut}} - \Delta G_{\text{gas}}$$

Interpretasi:

$$\Delta\Delta G < 0$$

→ pelarut membuat reaksi lebih menguntungkan

$$\Delta\Delta G > 0$$

→ pelarut membuat reaksi kurang menguntungkan

$$\Delta\Delta G \approx 0$$

→ pelarut tidak banyak mengubah kecenderungan reaksi

Namun, mahasiswa harus berhati-hati. $\Delta\Delta G$ bukan energi solvasi satu spesies, melainkan perubahan energi reaksi akibat pelarut. Jika ingin mengetahui spesies mana yang lebih distabilkan, perlu membandingkan energi solvasi masing-masing spesies.

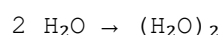
Contoh analisis:

Nilai $\Delta\Delta G$ protonasi amonia bernilai negatif, sehingga pelarut membuat protonasi lebih menguntungkan dibanding fase gas. Hal ini dapat dijelaskan oleh stabilisasi NH_4^+ sebagai spesies bermuatan oleh pelarut polar. Namun, hasil ini harus dibaca sebagai efek stabilisasi relatif, bukan semata-mata stabilisasi produk secara terpisah.

19. Analisis Hubungan Energi dan Stoikiometri

Stoikiometri sangat penting dalam analisis energi. Setiap energi spesies harus dikalikan dengan koefisien stoikiometri. Kesalahan stoikiometri menghasilkan kesalahan besar dalam ΔE , ΔH , dan ΔG .

Contoh dimer air:



Rumus benar:

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Rumus salah:

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - G_{\text{monomer}}$$

Kesalahan ini dapat membuat hasil tampak sangat negatif atau sangat positif secara tidak realistis. Oleh karena itu, dalam laporan mahasiswa harus menuliskan rumus reaksi dan rumus perhitungan energi.

Pernyataan laporan:

Karena reaksi dimerisasi melibatkan dua monomer sebagai reaktan, energi monomer dikalikan dua dalam perhitungan ΔE , ΔH , dan ΔG .

Pernyataan sederhana ini menunjukkan ketelitian stoikiometri.

20. Analisis Hubungan Termodinamika dan Kinetika

Praktikum 7 berfokus pada termodinamika. Nilai ΔG menunjukkan apakah produk lebih menguntungkan secara energi bebas dibanding reaktan. Namun, ΔG tidak menunjukkan laju reaksi.

Contoh:

ΔG negatif

→ produk lebih menguntungkan secara termodinamika

tetapi

→ reaksi dapat lambat jika energi aktivasi tinggi

Isomerisasi cis-trans 2-butena adalah contoh penting. Trans-2-butena dapat lebih stabil daripada cis-2-butena, tetapi perubahan cis menjadi trans tidak berlangsung melalui rotasi bebas sederhana karena ikatan rangkap C=C memiliki komponen π . Untuk memahami laju atau mekanisme, diperlukan analisis keadaan transisi.

Pernyataan analisis:

Nilai ΔG hanya menunjukkan perbedaan kestabilan termodinamika antara reaktan dan produk. Nilai ini tidak memberikan informasi tentang energi aktivasi. Oleh karena itu, hasil Praktikum 7 tidak boleh digunakan untuk menyimpulkan laju reaksi tanpa perhitungan keadaan transisi.

21. Analisis Kritis terhadap Data Komputasi

Data komputasi harus dianalisis secara kritis karena setiap angka bergantung pada metode. Beberapa faktor yang memengaruhi hasil adalah:

1. Metode komputasi.
2. Basis set.
3. Optimasi geometri.
4. Frekuensi imajiner.
5. Koreksi termal.
6. Model pelarut.
7. Keadaan standar.
8. Perlakuan entropi.
9. Pembulatan angka.
10. Stoikiometri reaksi.

Mahasiswa harus memeriksa apakah semua spesies dihitung dengan level teori yang sama. Jika tidak, perbandingan energi tidak valid. Mahasiswa juga harus memastikan tidak ada frekuensi imajiner untuk struktur minimum. Jika ada frekuensi imajiner, nilai termokimia tidak boleh digunakan tanpa perbaikan struktur.

Contoh pernyataan kritis:

Hasil perhitungan ini bergantung pada metode, basis set, dan model pelarut yang digunakan. Oleh karena itu, nilai ΔE , ΔH , dan ΔG ditafsirkan sebagai hasil model komputasi. Perbandingan energi hanya dianggap valid karena semua spesies dihitung dengan level teori yang sama.

22. Analisis Kritis terhadap Entropi pada Reaksi Asosiasi

Reaksi asosiasi seperti dimer air dan dimer asam asetat perlu perhatian khusus. Koreksi entropi dari model gas ideal dapat memberikan penalti besar karena dua molekul menjadi satu kompleks. Dalam larutan, interpretasi entropi bisa lebih rumit karena molekul pelarut dan keadaan standar larutan ikut berperan.

Karena itu, mahasiswa harus menulis analisis dengan hati-hati:

Nilai ΔG dimerisasi dari perhitungan frekuensi gas ideal dapat menunjukkan penalti entropi yang besar. Dalam larutan, nilai ini dapat berubah karena interaksi pelarut dan keadaan standar berbeda dari fase gas. Oleh karena itu, hasil dimerisasi harus ditafsirkan sebagai model termodinamika pada kondisi perhitungan.

Pernyataan ini tidak melemahkan hasil praktikum, tetapi menunjukkan kesadaran ilmiah bahwa model memiliki batas.

23. Analisis Kritis terhadap Model Pelarut Kontinu

Model pelarut kontinu berguna, tetapi tidak sempurna. Model ini baik untuk menangkap efek dielektrik umum, terutama pada spesies bermuatan. Namun, model ini tidak menggambarkan

molekul pelarut individual. Untuk sistem yang sangat bergantung pada ikatan hidrogen spesifik, hasil model kontinu dapat kurang lengkap.

Contoh sistem yang perlu perhatian:

1. Hidrasi formaldehida.
2. Dimer air.
3. Dimer asam asetat.
4. Etanol dalam pelarut polar.
5. Protonasi amonia dalam air.

Pernyataan kritis:

Model pelarut kontinu dapat memperkirakan stabilisasi elektrostatik, tetapi tidak secara eksplisit menggambarkan ikatan hidrogen antara pelarut dan zat terlarut. Untuk sistem yang sangat dipengaruhi ikatan hidrogen spesifik, pendekatan pelarut eksplisit dapat diperlukan pada kajian lanjutan.

Dengan demikian, mahasiswa memahami bahwa model kontinu adalah pendekatan awal, bukan representasi lengkap larutan nyata.

24. Format Analisis dalam Laporan Praktikum

Analisis dalam laporan Praktikum 7 dapat disusun dengan format berikut:

Nama sistem:
 Reaksi:
 Metode:
 Basis set:
 Kondisi:
 ΔE :
 ΔH :
 ΔG :
 Interpretasi ΔE :
 Interpretasi ΔH :
 Interpretasi ΔG :
 Efek pelarut:
 Keterbatasan:
 Kesimpulan:

Contoh analisis ringkas untuk dimer air:

Sistem dimer air dianalisis melalui reaksi $2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow (\text{H}_2\text{O})_2$. Nilai ΔE dan ΔH digunakan untuk menilai stabilisasi akibat ikatan hidrogen, sedangkan ΔG digunakan untuk menilai kecenderungan termodinamika. Jika ΔH negatif tetapi ΔG kurang menguntungkan, perbedaan ini menunjukkan adanya penalti entropi karena dua molekul bebas bergabung menjadi satu kompleks.

Contoh analisis untuk protonasi amonia:

Protonasi amonia menghasilkan NH_4^+ yang bermuatan positif. Perbandingan fase gas dan pelarut menunjukkan bahwa pelarut polar dapat menstabilkan spesies bermuatan. Jika ΔG dalam pelarut lebih rendah daripada fase gas, hal ini menunjukkan bahwa pelarut membuat protonasi lebih menguntungkan secara termodinamika.

25. Kesalahan Umum dalam Analisis

Beberapa kesalahan umum dalam analisis Praktikum 7 adalah:

Kesalahan	Mengapa Salah
Menyamakan ΔE dengan ΔG	ΔG memasukkan entropi, ΔE tidak
Menganggap ΔG negatif berarti reaksi cepat	ΔG bukan energi aktivasi
Mengabaikan koefisien stoikiometri	Selisih energi menjadi salah
Menganggap pelarut selalu menstabilkan produk	Pelarut menstabilkan reaktan dan produk secara relatif
Mengabaikan frekuensi imajiner	Struktur belum valid sebagai minimum
Mengabaikan metode dan basis set	Hasil tidak reproduibel
Menganggap model pelarut kontinu sempurna	Interaksi spesifik tidak selalu ditangkap
Mengabaikan entropi pada dimerisasi	ΔG dapat berbeda dari ΔH
Mengambil kesimpulan mutlak dari satu metode	Hasil bergantung model
Tidak membedakan termodinamika dan kinetika	Kestabilan tidak sama dengan laju

Kesalahan-kesalahan tersebut harus dihindari agar laporan praktikum memiliki kualitas ilmiah.

26. Implikasi Keilmuan Analisis Praktikum 7

Analisis Praktikum 7 memiliki beberapa implikasi keilmuan.

Pertama, mahasiswa memahami bahwa kestabilan molekul dapat dianalisis secara kuantitatif melalui energi relatif. Isomer, konformer, reaktan, produk, monomer, dan dimer dapat dibandingkan dengan pendekatan komputasi.

Kedua, mahasiswa memahami bahwa energi elektronik bukan satu-satunya ukuran kimia. Entalpi dan energi bebas Gibbs memberikan informasi yang lebih lengkap tentang kecenderungan termodinamika.

Ketiga, mahasiswa memahami bahwa entropi dapat mengubah kesimpulan. Proses yang tampak menguntungkan secara entalpi dapat menjadi kurang menguntungkan secara Gibbs karena penalti entropi.

Keempat, mahasiswa memahami bahwa pelarut memiliki peran aktif dalam kimia. Pelarut polar dapat menstabilkan spesies bermuatan dan mengubah energi reaksi.

Kelima, mahasiswa memahami bahwa semua hasil komputasi adalah hasil model. Metode, basis set, koreksi termal, dan model pelarut menentukan kualitas kesimpulan.

27. Implikasi Pedagogis Analisis

Secara pedagogis, subbab ini membentuk kemampuan berpikir tingkat tinggi. Mahasiswa tidak hanya menjalankan kode, tetapi menafsirkan hasil. Mahasiswa tidak hanya membuat diagram, tetapi menjelaskan makna diagram. Mahasiswa tidak hanya membaca ΔG , tetapi membedakan ΔG dari ΔE dan ΔH .

Kemampuan yang dilatih meliputi:

1. Membaca data energi.
2. Menghubungkan angka dengan konsep termodinamika.
3. Membedakan energi elektronik, entalpi, dan Gibbs.
4. Menjelaskan peran entropi.
5. Menafsirkan efek pelarut.
6. Mengkritisi model komputasi.
7. Menyusun argumentasi ilmiah.
8. Menghubungkan kimia komputasi dengan kimia fisik dan kimia organik.

Dengan demikian, Praktikum 7 melatih mahasiswa menjadi analis kimia komputasi, bukan sekadar operator software.

28. Sintesis Analisis Praktikum 7

Sintesis utama analisis Praktikum 7 dapat diringkas sebagai berikut:

ΔE

→ menunjukkan perubahan energi elektronik

ΔH

→ menunjukkan perubahan entalpi dengan koreksi termal

ΔG

→ menunjukkan kecenderungan termodinamika dengan kontribusi entropi

pelarut

→ mengubah kestabilan relatif reaktan dan produk

model komputasi

→ harus ditafsirkan dengan kesadaran keterbatasan

Alur lengkap analisis:

output energi

→ validasi struktur

→ perhitungan ΔE

→ perhitungan ΔH

→ perhitungan ΔG

→ perbandingan gas-pelarut

→ analisis struktur dan interaksi

→ kesimpulan termodinamika

Dengan sintesis ini, mahasiswa dapat memahami bahwa Praktikum 7 bukan sekadar latihan menghitung energi. Praktikum ini adalah latihan menalar hubungan antara struktur molekul, termodinamika, interaksi pelarut, dan kestabilan kimia.

29. Transisi ke Pertanyaan Diskusi

Subbab 10.9 telah membahas analisis hasil Praktikum 7. Mahasiswa telah diarahkan untuk membedakan energi elektronik, entalpi, dan energi bebas Gibbs, serta menjelaskan peran pelarut dalam menstabilkan spesies polar atau bermuatan. Pembahasan ini menunjukkan bahwa ΔE , ΔH , dan ΔG tidak selalu sama karena masing-masing memuat lapisan informasi yang berbeda. ΔE berhubungan dengan energi elektronik, ΔH memasukkan koreksi termal, sedangkan ΔG memasukkan kontribusi entropi. Pelarut dapat menurunkan energi spesies polar atau bermuatan, tetapi efeknya harus dianalisis sebagai stabilisasi relatif antara reaktan dan produk.

Subbab berikutnya akan membahas pertanyaan diskusi. Pada subbab 10.10, mahasiswa akan menjawab pertanyaan tentang mengapa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG , apa peran entropi dalam spontanitas reaksi, mengapa pelarut dapat menurunkan energi spesies bermuatan, dan apa keterbatasan model pelarut kontinu. Pertanyaan-pertanyaan tersebut akan menguji apakah mahasiswa benar-benar memahami hubungan antara data komputasi dan konsep termodinamika.

10.10 Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi dalam Praktikum 7 berfungsi untuk menguji apakah mahasiswa benar-benar memahami hubungan antara **energi reaksi, entalpi, entropi, energi bebas Gibbs, dan efek pelarut**. Setelah mahasiswa menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , membuat diagram energi reaksi, serta membandingkan fase gas dan pelarut, tahap berikutnya adalah menjelaskan makna hasil tersebut secara konseptual dan kritis.

Pertanyaan diskusi Praktikum 7 adalah:

1. Mengapa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG ?
2. Apa peran entropi dalam spontanitas reaksi?
3. Mengapa pelarut dapat menurunkan energi spesies bermuatan?
4. Apa keterbatasan model pelarut kontinu?

Keempat pertanyaan tersebut merupakan inti dari Praktikum 7. Pertanyaan pertama menguji pemahaman mahasiswa tentang perbedaan antara energi elektronik dan energi bebas Gibbs. Pertanyaan kedua menguji pemahaman tentang entropi sebagai faktor penentu kecenderungan termodinamika. Pertanyaan ketiga menghubungkan termodinamika dengan kimia larutan dan stabilisasi elektrostatis. Pertanyaan keempat menguji kemampuan mahasiswa berpikir kritis terhadap model komputasi.

Pertanyaan diskusi tidak boleh dijawab hanya dengan definisi singkat. Jawaban yang baik harus menggabungkan **definisi, teori, hasil praktikum, contoh sistem model, analisis kritis, dan kesimpulan kimia**. Mahasiswa harus menunjukkan bahwa mereka memahami mengapa angka ΔE , ΔH , dan ΔG dapat berbeda, mengapa entropi penting, mengapa pelarut berpengaruh besar pada ion, serta mengapa model pelarut kontinu tidak boleh dianggap sebagai gambaran sempurna larutan nyata.

1. Fungsi Pertanyaan Diskusi dalam Praktikum 7

Pertanyaan diskusi berfungsi sebagai jembatan antara hasil hitungan dan pemahaman ilmiah. Dalam praktikum kimia komputasi, mahasiswa sering memperoleh banyak angka dari output software dan kode Python. Namun, angka-angka tersebut belum menjadi pengetahuan kimia sampai ditafsirkan.

Pertanyaan diskusi membantu mahasiswa:

1. Menjelaskan perbedaan ΔE , ΔH , dan ΔG .
2. Memahami peran entropi dalam kecenderungan reaksi.
3. Menafsirkan efek pelarut terhadap spesies polar dan bermuatan.
4. Mengkritisi keterbatasan model pelarut kontinu.
5. Menghubungkan hasil komputasi dengan teori termodinamika.
6. Menghubungkan data energi dengan struktur molekul.
7. Membedakan termodinamika dan kinetika.
8. Menulis argumentasi ilmiah berbasis data.

Secara pedagogis, pertanyaan diskusi mendorong mahasiswa berpindah dari tahap “menghitung” menuju tahap “menalar”. Mahasiswa tidak hanya diminta mengetahui nilai ΔG , tetapi juga harus dapat menjelaskan mengapa ΔG berbeda dari ΔE , mengapa ΔG lebih relevan untuk spontanitas termodinamika, dan mengapa hasil komputasi tetap memiliki keterbatasan.

2. Prinsip Umum Menjawab Pertanyaan Diskusi

Jawaban pertanyaan diskusi sebaiknya mengikuti pola berikut:

definisi konsep
 → teori yang mendasari
 → hubungan dengan output praktikum
 → contoh sistem model
 → analisis kritis
 → kesimpulan

Contoh pola jawaban untuk pertanyaan tentang ΔE dan ΔG :

ΔE adalah perubahan energi elektronik.
 ΔG adalah perubahan energi bebas Gibbs.
 ΔG memasukkan kontribusi entalpi dan entropi.
 Karena entropi dapat bernilai penting, ΔE tidak selalu sama dengan ΔG .
 Contohnya pada dimerisasi air, ΔE dapat menguntungkan karena ikatan hidrogen, tetapi ΔG dapat kurang menguntungkan karena penurunan entropi translasi.

Jawaban seperti ini lebih baik daripada hanya menulis:

ΔE tidak sama dengan ΔG karena rumusnya berbeda.

Jawaban tersebut benar secara dangkal, tetapi belum menunjukkan pemahaman kimia.

3. Latar Historis Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan-pertanyaan dalam subbab ini berakar pada perkembangan termodinamika, mekanika statistik, mekanika kuantum, dan kimia larutan. Dalam termodinamika klasik, Gibbs memperkenalkan energi bebas sebagai besaran yang menentukan kecenderungan proses pada suhu dan tekanan tetap. Dalam mekanika statistik, Boltzmann memberikan dasar molekuler bagi entropi melalui hubungan antara entropi dan jumlah keadaan mikro. Dalam mekanika kuantum, energi elektronik molekul dapat dihitung melalui pendekatan struktur elektronik. Dalam kimia larutan, model pelarut dikembangkan untuk menjelaskan bagaimana lingkungan memengaruhi kestabilan spesies kimia.

Kimia komputasi modern menggabungkan semuanya. Energi elektronik dihitung dari metode struktur elektronik. Koreksi termal diperoleh dari analisis frekuensi. Entropi dihitung dari model translasi, rotasi, dan vibrasi. Energi bebas Gibbs dihitung dari entalpi dan entropi. Pelarut dapat dimasukkan melalui model kontinu seperti PCM, CPCM, COSMO, atau SMD.

Dengan demikian, pertanyaan diskusi Praktikum 7 bukan sekadar pertanyaan laporan. Pertanyaan ini mewakili persoalan inti dalam kimia komputasi: bagaimana menghubungkan angka hasil perhitungan dengan kecenderungan kimia yang bermakna.

4. Pertanyaan Diskusi 1: Mengapa ΔE Tidak Selalu Sama dengan ΔG ?

Pertanyaan pertama berbunyi:

Mengapa ΔE tidak selalu sama dengan ΔG ?

ΔE dan ΔG tidak selalu sama karena keduanya mengukur hal yang berbeda. ΔE biasanya merujuk pada perubahan energi elektronik antara produk dan reaktan. Energi elektronik diperoleh dari perhitungan struktur elektronik pada geometri tertentu. Sebaliknya, ΔG adalah perubahan energi bebas Gibbs yang memasukkan kontribusi entalpi dan entropi.

Secara umum:

$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

sedangkan:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Dengan demikian, ΔG tidak hanya bergantung pada energi elektronik, tetapi juga pada koreksi termal dan entropi. Karena ΔS dapat bernilai besar, terutama pada reaksi yang mengubah jumlah partikel, maka ΔG dapat berbeda signifikan dari ΔE .

Perbedaan ini sangat penting. ΔE menjawab pertanyaan:

Apakah produk lebih rendah energi elektroniknya daripada reaktan?

Sedangkan ΔG menjawab pertanyaan:

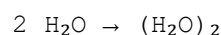
Apakah produk lebih menguntungkan secara termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu?

Dua pertanyaan tersebut tidak identik. Produk dapat lebih rendah energi elektroniknya tetapi tidak menguntungkan secara Gibbs jika entropi tidak mendukung.

5. Contoh ΔE dan ΔG pada Dimer Air

Dimer air adalah contoh yang sangat baik untuk menjelaskan perbedaan ΔE dan ΔG .

Reaksinya:



Energi elektronik dimerisasi:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Energi bebas Gibbs dimerisasi:

$$\Delta G = G_{\text{dimer}} - 2G_{\text{monomer}}$$

Pembentukan dimer air dapat menguntungkan secara energi elektronik karena terbentuk ikatan hidrogen. Ikatan hidrogen menurunkan energi sistem. Oleh karena itu, ΔE dapat bernilai negatif.

Namun, dua molekul air bebas berubah menjadi satu kompleks dimer. Jumlah partikel bebas berkurang. Kebebasan translasi dan rotasi juga berkurang. Akibatnya, entropi sistem menurun. Karena:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

maka jika ΔS negatif, suku $-T\Delta S$ menjadi positif. Akibatnya, ΔG menjadi lebih besar daripada ΔH atau ΔE .

Analisis:

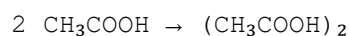
Dimer air dapat stabil secara energi elektronik karena adanya ikatan hidrogen, tetapi pembentukan dimer juga mengurangi entropi translasi. Oleh karena itu, ΔE dapat bernilai negatif, sedangkan ΔG dapat menjadi kurang negatif atau bahkan positif.

Contoh ini menunjukkan bahwa energi elektronik tidak cukup untuk menyimpulkan spontanitas termodinamika.

6. Contoh ΔE dan ΔG pada Dimer Asam Asetat

Dimer asam asetat juga memperlihatkan perbedaan antara ΔE dan ΔG .

Reaksinya:



Dimer asam asetat dapat distabilkan oleh dua ikatan hidrogen. Secara energi elektronik dan entalpi, pembentukan dimer dapat menguntungkan. Namun, secara entropi, dua monomer bebas menjadi satu dimer. Penurunan jumlah partikel bebas ini menghasilkan penalti entropi.

Analisis:

Pembentukan dimer asam asetat menguntungkan secara entalpi karena terbentuk dua ikatan hidrogen. Namun, proses tersebut mengurangi entropi translasi karena dua

monomer menjadi satu dimer. Karena itu, ΔG dimerisasi dapat kurang menguntungkan daripada ΔE atau ΔH .

Sistem ini menunjukkan bahwa ΔE , ΔH , dan ΔG memberikan informasi berbeda. ΔE menekankan struktur elektronik, ΔH menekankan aspek panas reaksi, sedangkan ΔG menekankan keseimbangan entalpi dan entropi.

7. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 1

Jawaban yang baik untuk pertanyaan pertama dapat ditulis sebagai berikut:

ΔE tidak selalu sama dengan ΔG karena ΔE hanya menunjukkan perubahan energi elektronik, sedangkan ΔG menunjukkan perubahan energi bebas Gibbs yang memasukkan kontribusi entalpi dan entropi. ΔG dihitung dengan hubungan $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$. Jika perubahan entropi besar, terutama pada reaksi asosiasi seperti dimerisasi air atau dimerisasi asam asetat, maka ΔG dapat berbeda signifikan dari ΔE . Oleh karena itu, ΔE berguna untuk melihat kestabilan elektronik, tetapi ΔG lebih relevan untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu.

Jawaban tersebut baik karena mencakup definisi, teori, rumus, contoh, dan interpretasi.

Jawaban yang kurang baik:

ΔE tidak sama dengan ΔG karena ΔG ada entropinya.

Jawaban tersebut benar tetapi terlalu ringkas dan belum menunjukkan penalaran.

8. Pertanyaan Diskusi 2: Apa Peran Entropi dalam Spontanitas Reaksi?

Pertanyaan kedua berbunyi:

Apa peran entropi dalam spontanitas reaksi?

Entropi berperan penting dalam menentukan spontanitas termodinamika melalui persamaan:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Pada suhu dan tekanan tetap, suatu proses secara termodinamika menguntungkan jika ΔG bernilai negatif. Dari persamaan tersebut terlihat bahwa entropi dapat membuat suatu reaksi menjadi lebih menguntungkan atau kurang menguntungkan.

Jika ΔS positif, maka $-T\Delta S$ bernilai negatif. Hal ini menurunkan ΔG dan membuat reaksi lebih menguntungkan.

Jika ΔS negatif, maka $-T\Delta S$ bernilai positif. Hal ini menaikkan ΔG dan membuat reaksi kurang menguntungkan.

Secara konseptual:

ΔS positif
 → $-T\Delta S$ negatif
 → ΔG menurun
 → reaksi lebih menguntungkan

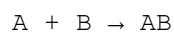
ΔS negatif
 → $-T\Delta S$ positif
 → ΔG meningkat
 → reaksi kurang menguntungkan

Entropi sering menjadi faktor penting pada reaksi yang mengubah jumlah partikel. Jika satu molekul terurai menjadi dua molekul, entropi translasi cenderung meningkat. Jika dua molekul bergabung menjadi satu kompleks, entropi translasi cenderung menurun.

9. Entropi pada Reaksi Asosiasi

Reaksi asosiasi adalah contoh paling jelas untuk memahami peran entropi. Dimer air dan dimer asam asetat termasuk reaksi asosiasi.

Contoh:



Sebelum reaksi, terdapat dua molekul bebas. Setelah reaksi, terdapat satu kompleks. Jumlah partikel bebas berkurang. Kebebasan translasi berkurang. Karena itu, entropi biasanya menurun.

Secara konseptual:

dua molekul bebas
 → banyak keadaan translasi

satu kompleks
 → keadaan translasi lebih terbatas

hasil
 → ΔS negatif

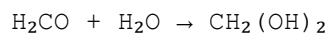
Jika ΔS negatif, maka $-T\Delta S$ positif. Ini membuat ΔG menjadi lebih tinggi. Oleh karena itu, meskipun pembentukan ikatan hidrogen menurunkan entalpi, penalti entropi dapat mengurangi keuntungan termodinamika.

Contoh analisis dimer air:

Pada dimerisasi air, dua molekul H_2O bergabung menjadi satu dimer. Pembentukan ikatan hidrogen dapat membuat ΔH negatif, tetapi pengurangan jumlah partikel bebas membuat ΔS negatif. Akibatnya, ΔG menjadi kurang negatif dibanding ΔH .

10. Entropi pada Hidrasi Formaldehida

Hidrasi formaldehida juga menunjukkan peran entropi:



Dua molekul reaktan bergabung menjadi satu molekul produk. Secara umum, proses seperti ini dapat mengalami penurunan entropi translasi. Jika pembentukan produk menguntungkan secara entalpi tetapi entropi menurun, maka ΔG dapat menjadi kurang menguntungkan.

Analisis:

Hidrasi formaldehida dapat membentuk produk yang stabil melalui pembentukan ikatan baru, tetapi reaksi ini juga mengubah dua molekul reaktan menjadi satu molekul produk. Penurunan jumlah partikel bebas dapat menurunkan entropi sehingga ΔG tidak selalu sejalan dengan ΔE atau ΔH .

Hal ini menunjukkan bahwa entropi tidak dapat diabaikan pada reaksi yang mengubah jumlah spesies.

11. Entropi dan Suhu

Entropi dalam persamaan Gibbs dikalikan oleh suhu:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Artinya, pengaruh entropi menjadi lebih besar pada suhu lebih tinggi. Jika ΔS positif, kenaikan suhu membuat $-T\Delta S$ semakin negatif, sehingga reaksi semakin menguntungkan. Jika ΔS negatif, kenaikan suhu membuat $-T\Delta S$ semakin positif, sehingga reaksi semakin tidak menguntungkan.

Secara konseptual:

reaksi dengan ΔS positif
 → lebih diuntungkan pada suhu tinggi

reaksi dengan ΔS negatif
 → dapat menjadi kurang menguntungkan pada suhu tinggi

Dalam Praktikum 7, sebagian besar output termokimia biasanya dihitung pada suhu standar seperti 298,15 K. Namun, mahasiswa perlu memahami bahwa nilai ΔG bergantung pada suhu. Jika suhu diubah, kontribusi entropi juga berubah.

12. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 2

Jawaban yang baik untuk pertanyaan kedua dapat ditulis sebagai berikut:

Entropi berperan dalam spontanitas reaksi melalui persamaan $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$. Jika perubahan entropi positif, suku $-T\Delta S$ bernilai negatif sehingga ΔG menurun dan reaksi menjadi lebih menguntungkan secara termodinamika. Jika perubahan entropi negatif, suku $-T\Delta S$ bernilai positif sehingga ΔG meningkat dan reaksi menjadi kurang menguntungkan. Pada reaksi asosiasi seperti dimerisasi air dan dimerisasi asam asetat, dua molekul bebas bergabung menjadi satu kompleks sehingga entropi translasi menurun. Akibatnya, meskipun ΔH dapat negatif karena terbentuk ikatan hidrogen, ΔG dapat menjadi kurang menguntungkan.

Jawaban ini baik karena menjelaskan teori, rumus, tanda, contoh, dan implikasi.

Jawaban yang kurang baik:

Entropi membuat reaksi spontan.

Jawaban tersebut terlalu umum dan tidak menjelaskan bahwa entropi dapat mendukung atau menghambat spontanitas tergantung tanda ΔS .

13. Pertanyaan Diskusi 3: Mengapa Pelarut Dapat Menurunkan Energi Spesies Bermuatan?

Pertanyaan ketiga berbunyi:

Mengapa pelarut dapat menurunkan energi spesies bermuatan?

Pelarut, terutama pelarut polar, dapat menurunkan energi spesies bermuatan karena adanya interaksi elektrostatik antara muatan zat terlarut dan respons medium pelarut. Spesies bermuatan menghasilkan medan listrik. Pelarut polar memiliki distribusi muatan parsial dan dapat merespons medan tersebut melalui orientasi dipol atau polarisasi medium. Respons ini menstabilkan spesies bermuatan dan menurunkan energi relatifnya.

Dalam model pelarut kontinu, pelarut digambarkan sebagai medium dielektrik. Zat terlarut ditempatkan dalam rongga. Distribusi muatan zat terlarut mempolarisasi medium pelarut. Medium pelarut kemudian menghasilkan medan reaksi yang menstabilkan zat terlarut.

Secara konseptual:

ion

→ menghasilkan medan listrik kuat

pelarut polar

→ merespons medan listrik

respons pelarut

→ menstabilkan ion

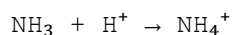
energi ion

→ menurun

Semakin besar polaritas atau muatan spesies, semakin besar pengaruh pelarut polar. Oleh karena itu, ion seperti NH_4^+ biasanya lebih sensitif terhadap pelarut dibanding molekul netral nonpolar seperti 2-butena.

14. Contoh Protonasi Amonia dan Stabilisasi NH_4^+

Protonasi amonia adalah contoh utama dalam Praktikum 7:



NH_3 adalah molekul netral polar. NH_4^+ adalah ion bermuatan positif. Dalam pelarut polar, NH_4^+ dapat distabilkan lebih kuat daripada NH_3 karena muatannya menghasilkan interaksi elektrostatik yang lebih besar dengan medium pelarut.

Jika hasil praktikum menunjukkan:

$\Delta G_{\text{pelarut}}$ lebih rendah daripada ΔG_{gas}

maka hal ini dapat ditafsirkan bahwa pelarut membuat protonasi lebih menguntungkan secara termodinamika. Penyebabnya adalah stabilisasi relatif NH_4^+ oleh pelarut.

Analisis:

Pelarut polar menstabilkan NH_4^+ karena ion tersebut bermuatan positif dan menghasilkan medan elektrostatik yang kuat. Medium pelarut merespons muatan tersebut sehingga energi NH_4^+ menurun. Akibatnya, ΔG protonasi dalam pelarut dapat lebih rendah daripada dalam fase gas.

Namun, analisis harus tetap kritis. Proton bebas H^+ adalah model ideal. Dalam larutan nyata, proton biasanya tersolvasi. Oleh karena itu, hasil protonasi amonia harus dipahami sebagai model konseptual untuk mempelajari stabilisasi ion, bukan gambaran lengkap kimia proton dalam larutan.

15. Pelarut Polar dan Konstanta Dielektrik

Kemampuan pelarut menstabilkan spesies bermuatan berkaitan dengan konstanta dielektrik. Pelarut polar seperti air memiliki konstanta dielektrik tinggi. Medium dengan konstanta dielektrik tinggi dapat meredam interaksi elektrostatik dan menstabilkan muatan.

Secara konseptual:

konstanta dielektrik tinggi
→ stabilisasi muatan lebih besar

konstanta dielektrik rendah
→ stabilisasi muatan lebih kecil

Contoh:

air
→ pelarut polar
→ stabilisasi ion kuat

heksana
→ pelarut nonpolar
→ stabilisasi ion lemah

Dalam Praktikum 7, mahasiswa dapat membandingkan fase gas dan model pelarut untuk melihat pengaruh ini. Spesies bermuatan seperti NH_4^+ diharapkan lebih dipengaruhi pelarut daripada molekul netral seperti cis-2-butena atau trans-2-butena.

16. Pelarut dan Stabilisasi Relatif

Penting dipahami bahwa pelarut tidak hanya menstabilkan satu spesies secara mutlak. Dalam reaksi, yang menentukan ΔG adalah stabilisasi relatif antara reaktan dan produk.

Jika pelarut menstabilkan produk lebih besar daripada reaktan, maka ΔG menjadi lebih negatif. Jika pelarut menstabilkan reaktan lebih besar daripada produk, maka ΔG menjadi lebih positif. Jika pelarut menstabilkan reaktan dan produk hampir sama, maka ΔG tidak banyak berubah.

Secara konseptual:

$\Delta G_{\text{pelarut}}$ berubah
 → karena stabilisasi relatif reaktan dan produk berubah

Contoh pada protonasi amonia:

NH_4^+ distabilkan pelarut lebih besar daripada NH_3
 → protonasi menjadi lebih menguntungkan

Contoh pada dimerisasi asam asetat:

monomer dapat distabilkan pelarut
 → dimerisasi dapat menjadi kurang menguntungkan

Dengan demikian, pelarut tidak selalu membuat produk lebih stabil. Pelarut membuat stabilisasi relatif berubah.

17. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 3

Jawaban yang baik untuk pertanyaan ketiga dapat ditulis sebagai berikut:

Pelarut dapat menurunkan energi spesies bermuatan karena spesies bermuatan menghasilkan medan listrik yang kuat dan dapat berinteraksi secara elektrostatik dengan pelarut polar. Dalam model pelarut kontinu, pelarut diperlakukan sebagai medium dielektrik yang merespons distribusi muatan zat terlarut. Respons medium tersebut menstabilkan spesies bermuatan sehingga energinya menurun. Contohnya, NH_4^+ pada protonasi amonia dapat lebih stabil dalam pelarut polar dibanding fase gas. Namun, perubahan ΔG reaksi ditentukan oleh stabilisasi relatif antara reaktan dan produk, bukan hanya stabilisasi satu spesies.

Jawaban tersebut baik karena menjelaskan mekanisme elektrostatik, model kontinu, contoh, dan stabilisasi relatif.

Jawaban yang kurang baik:

Pelarut menurunkan energi karena ion larut dalam pelarut.

Jawaban tersebut terlalu umum dan belum menjelaskan dasar elektrostatik atau model komputasinya.

18. Pertanyaan Diskusi 4: Apa Keterbatasan Model Pelarut Kontinu?

Pertanyaan keempat berbunyi:

Apa keterbatasan model pelarut kontinu?

Model pelarut kontinu adalah pendekatan yang menggambarkan pelarut sebagai medium homogen dengan konstanta dielektrik tertentu. Zat terlarut ditempatkan dalam rongga, sedangkan pelarut diperlakukan sebagai medium yang merespons distribusi muatan zat terlarut. Model ini sangat berguna karena efisien dan dapat memperkirakan efek elektrostatik pelarut tanpa memasukkan banyak molekul pelarut eksplisit.

Namun, model pelarut kontinu memiliki keterbatasan. Keterbatasan utamanya adalah bahwa model ini tidak menggambarkan molekul pelarut satu per satu. Karena itu, model ini tidak selalu mampu menangkap interaksi spesifik seperti ikatan hidrogen langsung, orientasi molekul pelarut, struktur jaringan pelarut, efek mikrosolvasi, dan dinamika pelarut.

Secara konseptual:

model pelarut kontinu
→ baik untuk efek dielektrik umum

tetapi
→ lemah untuk interaksi spesifik molekul pelarut

Keterbatasan ini penting karena banyak sistem kimia sangat dipengaruhi oleh ikatan hidrogen atau struktur lokal pelarut. Misalnya, hidrasi formaldehida, dimer air, dimer asam asetat, dan protonasi amonia dalam air dapat melibatkan interaksi pelarut yang sangat spesifik.

19. Keterbatasan 1: Tidak Menampilkan Molekul Pelarut Eksplisit

Model pelarut kontinu tidak menampilkan molekul pelarut individual. Pelarut hanya menjadi medium dielektrik. Akibatnya, model ini tidak dapat menunjukkan secara langsung berapa molekul pelarut yang berinteraksi dengan zat terlarut, bagaimana orientasinya, atau apakah terbentuk ikatan hidrogen spesifik.

Contoh:

NH_4^+ dalam air
→ dalam kenyataan dapat dikelilingi molekul air

model kontinu
→ hanya menggambarkan medium air secara rata-rata

Jika peneliti ingin mengetahui struktur solvasi pertama di sekitar ion, model kontinu saja tidak cukup. Diperlukan pelarut eksplisit atau pendekatan campuran, misalnya beberapa molekul air eksplisit ditambah model kontinu.

20. Keterbatasan 2: Ikatan Hidrogen Spesifik Tidak Selalu Tertangkap

Ikatan hidrogen adalah interaksi yang terarah. Dalam sistem seperti dimer air, asam asetat, etanol, dan hidrasi formaldehida, ikatan hidrogen dapat sangat menentukan struktur dan energi. Model pelarut kontinu dapat menangkap efek polaritas umum, tetapi tidak selalu menangkap ikatan hidrogen tertentu antara pelarut dan zat terlarut.

Contoh:

asam asetat monomer dalam air
→ dapat membentuk ikatan hidrogen dengan air

model kontinu
→ tidak menunjukkan molekul air yang membentuk ikatan hidrogen

Akibatnya, model kontinu dapat kurang akurat jika interaksi spesifik pelarut sangat menentukan kestabilan.

21. Keterbatasan 3: Dinamika Pelarut Tidak Digambarkan

Larutan nyata bersifat dinamis. Molekul pelarut bergerak, berotasi, bertukar posisi, membentuk dan memutus ikatan hidrogen. Model pelarut kontinu tidak menggambarkan dinamika ini. Model ini memberikan gambaran rata-rata, bukan simulasi gerak molekul pelarut.

Untuk mempelajari dinamika pelarut, metode lain seperti dinamika molekul klasik, dinamika molekul *ab initio*, atau pendekatan sampling eksplisit lebih sesuai. Namun, metode tersebut lebih kompleks dan lebih mahal secara komputasi.

Dalam Praktikum 7, model kontinu digunakan karena sederhana dan cocok untuk pembelajaran dasar. Mahasiswa cukup memahami bahwa model kontinu adalah pendekatan rata-rata.

22. Keterbatasan 4: Bergantung pada Rongga dan Parameter

Dalam model pelarut kontinu, zat terlarut ditempatkan dalam rongga molekuler. Bentuk dan ukuran rongga memengaruhi hasil. Parameter pelarut seperti konstanta dielektrik, radius atom, dan parameter non-elektrostatik juga dapat memengaruhi energi.

Karena itu, dua model pelarut berbeda dapat memberikan hasil berbeda. Misalnya, PCM, CPCM, COSMO, dan SMD memiliki formulasi dan parameter yang tidak identik. Hasil dari satu model tidak boleh dianggap pasti sama dengan model lain.

Analisis kritis:

Nilai energi dalam model pelarut kontinu bergantung pada pilihan model, definisi rongga, parameter pelarut, dan metode elektronik. Oleh karena itu, hasil pelarut kontinu harus dilaporkan bersama nama model pelarut yang digunakan.

23. Keterbatasan 5: Keadaan Standar dan Konsentrasi

Perhitungan termokimia dalam fase gas sering menggunakan keadaan standar 1 atm, sedangkan larutan sering menggunakan keadaan standar 1 M. Perbedaan keadaan standar dapat memengaruhi nilai energi bebas. Model pelarut kontinu tidak selalu secara otomatis menyelesaikan semua persoalan keadaan standar.

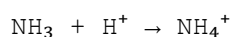
Dalam praktikum dasar, detail koreksi 1 atm ke 1 M tidak harus dihitung secara mendalam. Namun, mahasiswa perlu menyadari bahwa energi bebas larutan bergantung pada asumsi keadaan standar. Jika membandingkan hasil komputasi dengan data eksperimen larutan, koreksi keadaan standar dapat menjadi penting.

Pernyataan kritis:

Nilai ΔG dalam model pelarut kontinu bergantung pada asumsi keadaan standar. Untuk perbandingan kuantitatif dengan data eksperimen larutan, koreksi keadaan standar dan konsentrasi dapat diperlukan.

24. Keterbatasan 6: Reaksi Ionik dan Proton Bebas

Sistem protonasi amonia menggunakan model:

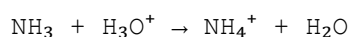


Model ini berguna untuk pembelajaran, tetapi H^+ bebas bukan representasi realistis proton dalam larutan. Dalam larutan air, proton biasanya tersolvasi. Karena itu, model pelarut kontinu untuk protonasi sederhana harus ditafsirkan hati-hati.

Analisis kritis:

Protonasi amonia dengan H^+ bebas merupakan model konseptual. Dalam larutan nyata, proton tersolvasi oleh molekul pelarut. Oleh karena itu, hasil perhitungan protonasi harus digunakan untuk memahami kecenderungan stabilisasi ion, bukan sebagai gambaran lengkap kimia proton dalam larutan.

Jika ingin model yang lebih realistis, reaksi dapat ditulis sebagai transfer proton:



Namun, model tersebut juga memerlukan perlakuan solvasi yang hati-hati.

25. Jawaban yang Diharapkan untuk Pertanyaan 4

Jawaban yang baik untuk pertanyaan keempat dapat ditulis sebagai berikut:

Model pelarut kontinu memiliki keterbatasan karena pelarut diperlakukan sebagai medium homogen, bukan sebagai molekul-molekul eksplisit. Model ini dapat menangkap efek dielektrik umum dan stabilisasi elektrostatik, tetapi tidak selalu menggambarkan ikatan hidrogen spesifik, orientasi molekul pelarut, struktur mikrosolvasi, dinamika pelarut, serta efek keadaan standar secara lengkap. Hasilnya juga bergantung pada pilihan model, parameter pelarut, dan bentuk rongga. Oleh karena itu, model pelarut kontinu berguna sebagai pendekatan awal, tetapi untuk sistem yang sangat dipengaruhi interaksi pelarut spesifik dapat diperlukan pelarut eksplisit atau pendekatan yang lebih lanjut.

Jawaban ini baik karena menyebut kelebihan, keterbatasan, dan konteks penggunaannya.

Jawaban yang kurang baik:

Model pelarut kontinu kurang akurat.

Jawaban tersebut terlalu umum dan tidak menjelaskan mengapa atau dalam kondisi apa model tersebut terbatas.

26. Hubungan Empat Pertanyaan Diskusi

Keempat pertanyaan diskusi saling berkaitan. ΔE tidak selalu sama dengan ΔG karena ΔG memasukkan entropi. Entropi berperan dalam spontanitas melalui suku $-T\Delta S$. Pelarut dapat mengubah ΔG karena menstabilkan reaktan dan produk secara berbeda. Model pelarut kontinu membantu memperkirakan efek pelarut, tetapi memiliki keterbatasan karena tidak menggambarkan molekul pelarut secara eksplisit.

Hubungan konseptualnya:

ΔE

→ energi elektronik

ΔH

→ energi dengan koreksi termal

ΔG

→ $\Delta H - T\Delta S$

entropi

→ memengaruhi spontanitas

pelarut

→ mengubah stabilisasi relatif

model kontinu

→ pendekatan untuk efek pelarut

Dengan memahami hubungan ini, mahasiswa dapat menyusun jawaban diskusi yang utuh.

27. Contoh Jawaban Terintegrasi

Mahasiswa dapat menulis jawaban terintegrasi sebagai berikut:

ΔE tidak selalu sama dengan ΔG karena ΔE hanya menunjukkan perubahan energi elektronik, sedangkan ΔG menunjukkan perubahan energi bebas Gibbs yang memasukkan kontribusi entalpi dan entropi. Hubungan $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ menunjukkan bahwa entropi dapat mengubah kecenderungan termodinamika suatu reaksi.

Entropi berperan dalam spontanitas karena jika ΔS positif, suku $-T\Delta S$ menurunkan ΔG sehingga reaksi lebih menguntungkan. Sebaliknya, jika ΔS negatif, suku $-T\Delta S$ menaikkan ΔG sehingga reaksi kurang menguntungkan. Pada reaksi asosiasi seperti dimerisasi air atau dimerisasi asam asetat, entropi translasi menurun karena dua molekul bebas menjadi satu kompleks.

Pelarut dapat menurunkan energi spesies bermuatan karena ion menghasilkan medan listrik yang kuat dan dapat distabilkan oleh pelarut polar. Dalam model pelarut kontinu, pelarut diperlakukan sebagai medium dielektrik yang merespons distribusi muatan zat terlarut. Contohnya, NH_4^+ dapat lebih stabil dalam pelarut polar dibanding fase gas.

Namun, model pelarut kontinu memiliki keterbatasan. Model ini tidak menggambarkan molekul pelarut secara eksplisit, sehingga tidak selalu menangkap ikatan hidrogen spesifik, orientasi pelarut, mikrosolvasi, dinamika pelarut, dan efek keadaan standar secara lengkap. Oleh karena itu, hasil model pelarut kontinu harus ditafsirkan sebagai pendekatan, bukan gambaran sempurna larutan nyata.

Jawaban tersebut menunjukkan hubungan antarkonsep dan dapat digunakan sebagai model jawaban laporan.

28. Rubrik Penilaian Pertanyaan Diskusi

Jawaban pertanyaan diskusi dapat dinilai dengan rubrik berikut:

Aspek	Kriteria Jawaban Baik
Perbedaan ΔE dan ΔG	Menjelaskan bahwa ΔE adalah energi elektronik, sedangkan ΔG memasukkan entalpi dan entropi
Peran entropi	Menggunakan persamaan $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ dan menjelaskan tanda ΔS
Contoh asosiasi	Menggunakan dimer air atau dimer asam asetat untuk menjelaskan penalti entropi
Efek pelarut	Menjelaskan stabilisasi elektrostatik spesies polar atau bermuatan

Contoh ion	Menggunakan NH_4^+ atau protonasi amonia sebagai contoh
Model pelarut kontinu	Menjelaskan medium dielektrik dan rongga zat terlarut
Keterbatasan model	Menyebut ikatan hidrogen spesifik, mikrosolvasi, dinamika, parameter, atau keadaan standar
Analisis kritis	Tidak menganggap model sebagai kebenaran mutlak
Bahasa ilmiah	Menggunakan istilah energi elektronik, entalpi, entropi, Gibbs, pelarut kontinu, dan stabilisasi relatif dengan tepat
Keterhubungan konsep	Menunjukkan hubungan antara output praktikum dan teori termodinamika

Rubrik ini membantu mahasiswa memahami bahwa jawaban diskusi harus argumentatif dan berbasis konsep, bukan hafalan.

29. Kesalahan Umum dalam Menjawab Pertanyaan Diskusi

Beberapa kesalahan umum yang harus dihindari adalah:

Kesalahan	Mengapa Salah
Menyamakan ΔE dengan ΔG	ΔG memasukkan entropi, ΔE tidak
Menganggap ΔG negatif berarti reaksi cepat	ΔG bukan energi aktivasi
Mengatakan entropi selalu membuat reaksi spontan	Entropi dapat mendukung atau menghambat tergantung tanda ΔS
Mengabaikan reaksi asosiasi	Dimerisasi sangat dipengaruhi penalti entropi
Menganggap pelarut selalu menstabilkan produk	Pelarut menstabilkan reaktan dan produk secara relatif
Menganggap ion stabil di semua pelarut	Stabilitas ion sangat bergantung pada polaritas pelarut
Menganggap model kontinu menggambarkan semua molekul pelarut	Model kontinu tidak eksplisit
Tidak menyebut keterbatasan proton bebas	H^+ dalam larutan nyata tersolvasi
Tidak menyebut model dan parameter pelarut	Hasil tidak reproduibel
Menulis jawaban terlalu singkat	Tidak menunjukkan pemahaman mendalam

Kesalahan ini harus dihindari dalam laporan Praktikum 7.

30. Implikasi Keilmuan Pertanyaan Diskusi

Pertanyaan diskusi Praktikum 7 memiliki implikasi keilmuan yang luas.

Pertama, mahasiswa memahami bahwa energi elektronik hanyalah salah satu komponen dalam penilaian kestabilan. Energi bebas Gibbs memberikan gambaran termodinamika yang lebih lengkap karena memasukkan entropi.

Kedua, mahasiswa memahami bahwa entropi bukan konsep abstrak semata. Entropi memiliki konsekuensi nyata dalam reaksi asosiasi, dimerisasi, hidrasi, dan perubahan jumlah partikel.

Ketiga, mahasiswa memahami bahwa pelarut dapat mengubah kecenderungan reaksi. Kimia dalam fase gas tidak selalu sama dengan kimia dalam larutan.

Keempat, mahasiswa memahami bahwa model komputasi memiliki batas. Model pelarut kontinu sangat berguna, tetapi tidak menggambarkan semua detail larutan nyata.

Kelima, mahasiswa belajar bahwa kimia komputasi memerlukan sikap ilmiah kritis. Angka hasil software harus dihubungkan dengan teori, struktur, metode, dan keterbatasan model.

31. Implikasi Pedagogis Pertanyaan Diskusi

Secara pedagogis, pertanyaan diskusi ini melatih kemampuan berpikir tingkat tinggi. Mahasiswa tidak hanya mengingat rumus, tetapi menggunakan rumus untuk menjelaskan fenomena. Mahasiswa tidak hanya membaca output, tetapi menghubungkan output dengan konsep.

Kemampuan yang dilatih meliputi:

1. Menjelaskan perbedaan besaran energi.
2. Menggunakan persamaan Gibbs secara konseptual.
3. Menghubungkan entropi dengan jumlah partikel.
4. Menafsirkan dimerisasi dan asosiasi molekul.
5. Menjelaskan stabilisasi ion oleh pelarut.
6. Mengkritisi model pelarut kontinu.
7. Membedakan model dan realitas kimia.
8. Menulis jawaban ilmiah argumentatif.

Dengan demikian, subbab 10.10 berfungsi sebagai penguatan konseptual akhir Praktikum 7. Mahasiswa diharapkan tidak hanya mampu menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG , tetapi juga mampu menjelaskan makna setiap besaran dan keterbatasan model yang digunakan.

32. Sintesis Akhir Pertanyaan Diskusi Praktikum 7

Sintesis akhir dari pertanyaan diskusi Praktikum 7 dapat diringkas sebagai berikut:

ΔE

→ perubahan energi elektronik

ΔH

→ perubahan entalpi dengan koreksi termal

ΔG

→ perubahan energi bebas Gibbs

entropi

→ menentukan perbedaan ΔH dan ΔG

pelarut

→ menstabilkan spesies polar atau bermuatan

model pelarut kontinu

→ pendekatan praktis dengan keterbatasan

Keempat pertanyaan diskusi membentuk satu kesatuan logis. Pertanyaan pertama membedakan energi elektronik dan Gibbs. Pertanyaan kedua menjelaskan mengapa Gibbs dipengaruhi entropi. Pertanyaan ketiga menjelaskan bagaimana pelarut mengubah energi spesies bermuatan. Pertanyaan keempat menegaskan bahwa model pelarut kontinu harus digunakan secara kritis.

Dengan demikian, Praktikum 7 tidak hanya menghasilkan tabel dan grafik, tetapi membentuk kemampuan mahasiswa untuk menafsirkan data energi reaksi secara ilmiah.

33. Transisi ke Penutup Bab 10

Subbab 10.10 telah membahas pertanyaan diskusi Praktikum 7. Pertanyaan tentang perbedaan ΔE dan ΔG menegaskan bahwa energi elektronik tidak identik dengan energi bebas Gibbs. Pertanyaan tentang entropi menegaskan bahwa spontanitas termodinamika ditentukan oleh hubungan $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$. Pertanyaan tentang pelarut menegaskan bahwa spesies bermuatan dapat distabilkan oleh medium polar. Pertanyaan tentang model pelarut kontinu menegaskan bahwa hasil komputasi harus ditafsirkan sebagai pendekatan yang memiliki batas.

Dengan selesainya subbab ini, rangkaian utama Bab 10 telah lengkap. Mahasiswa telah mempelajari tujuan praktikum, dasar teori, software, sistem reaksi model, jalur ChemCompute, jalur Python mandiri, nama file kode, output kode, analisis, dan pertanyaan diskusi. Tahap berikutnya adalah menyusun penutup Bab 10 yang merangkum keseluruhan pembelajaran tentang energi reaksi, termodinamika, dan efek pelarut.

Penutup Bab 10

Bab 10 telah membahas Praktikum 7 tentang **energi reaksi, termodinamika, dan efek pelarut**. Bab ini menjadi salah satu titik penting dalam pembelajaran kimia komputasi karena mahasiswa tidak lagi hanya menganalisis satu molekul secara terpisah, tetapi mulai membandingkan beberapa spesies dalam suatu perubahan kimia. Dalam bab ini, molekul dipahami sebagai bagian dari proses: isomer dapat berubah menjadi isomer lain, molekul netral dapat terprotonasi, karbonil dapat mengalami hidrasi, dua molekul dapat membentuk dimer, konformer dapat dibandingkan kestabilannya, dan pelarut dapat mengubah energi relatif suatu sistem.

Gagasan utama Bab 10 adalah bahwa kimia komputasi dapat digunakan untuk menjawab pertanyaan termodinamika secara kuantitatif. Pertanyaan seperti “produk lebih stabil atau tidak?”, “reaksi menguntungkan atau tidak?”, “apakah dimer lebih stabil daripada monomer?”, “apakah pelarut menstabilkan ion?”, dan “mengapa ΔE tidak sama dengan ΔG ?” dapat dijawab melalui perhitungan energi yang dilakukan secara konsisten dan dianalisis secara kritis.

Bab ini menegaskan bahwa energi dalam kimia komputasi tidak tunggal. Ada **energi elektronik, zero-point energy, entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs**. Setiap besaran memiliki makna berbeda. Energi elektronik menggambarkan kestabilan berdasarkan struktur elektronik. Zero-point energy mengingatkan bahwa molekul tetap memiliki energi vibrasi dasar meskipun berada pada keadaan kuantum terendah. Entalpi memasukkan koreksi termal dan berkaitan dengan aspek panas reaksi. Entropi menggambarkan jumlah keadaan mikro dan derajat kebebasan sistem. Energi bebas Gibbs menggabungkan entalpi dan entropi untuk menilai kecenderungan termodinamika pada suhu dan tekanan tertentu.

Hubungan utama yang menjadi pusat Bab 10 adalah:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Persamaan ini menunjukkan bahwa spontanitas termodinamika tidak hanya ditentukan oleh apakah energi turun, tetapi juga oleh perubahan entropi. Reaksi yang menguntungkan secara entalpi belum tentu menguntungkan secara Gibbs jika mengalami penalti entropi yang besar. Sebaliknya, proses dengan kontribusi entropi positif dapat menjadi lebih menguntungkan pada suhu tertentu.

Rangkuman Bab 10

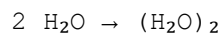
Bab 10 dapat diringkas melalui beberapa pokok utama berikut.

Pertama, **energi reaksi** dihitung sebagai selisih energi antara produk dan reaktan. Bentuk dasarnya adalah:

$$\Delta E = \Sigma E_{\text{produk}} - \Sigma E_{\text{reaktan}}$$

Rumus ini berlaku untuk energi elektronik, entalpi, maupun energi bebas Gibbs, dengan tetap memperhatikan koefisien stoikiometri.

Kedua, **stoikiometri sangat penting** dalam perhitungan energi. Pada dimerisasi air:



rumus yang benar adalah:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - 2E_{\text{monomer}}$$

Bukan:

$$\Delta E = E_{\text{dimer}} - E_{\text{monomer}}$$

Kesalahan koefisien akan menghasilkan kesalahan besar dalam ΔE , ΔH , dan ΔG .

Ketiga, **energi elektronik tidak sama dengan energi bebas Gibbs**. ΔE hanya menunjukkan perubahan energi elektronik, sedangkan ΔG memasukkan entalpi dan entropi. Oleh karena itu, ΔG lebih relevan untuk menilai kecenderungan termodinamika pada kondisi tertentu.

Keempat, **entalpi dan entropi dapat memberikan pengaruh berlawanan**. Pada dimer air atau dimer asam asetat, pembentukan ikatan hidrogen dapat membuat ΔH menjadi negatif, tetapi penggabungan dua molekul menjadi satu kompleks dapat menurunkan entropi sehingga ΔG menjadi kurang menguntungkan.

Kelima, **pelarut dapat mengubah kestabilan relatif spesies kimia**. Spesies bermuatan seperti NH_4^+ dapat distabilkan oleh pelarut polar karena interaksi elektrostatik dengan medium pelarut. Namun, pelarut tidak selalu menstabilkan produk; pelarut dapat menstabilkan reaktan, produk, atau keduanya dalam derajat yang berbeda.

Keenam, **model pelarut kontinu merupakan pendekatan praktis**, tetapi memiliki keterbatasan. Model ini dapat menggambarkan efek dielektrik umum, tetapi tidak selalu menangkap ikatan hidrogen spesifik, orientasi molekul pelarut, mikrosolvasi, dinamika pelarut, dan efek keadaan standar secara lengkap.

Ketujuh, **Python digunakan untuk mengolah data**, bukan menggantikan seluruh perhitungan kimia kuantum. Data energi diperoleh dari ChemCompute, GAMESS, ORCA, Gaussian, Psi4, PySCF, atau software lain, kemudian Python digunakan untuk menghitung ΔE , ΔH , ΔG , mengonversi Hartree ke kJ/mol, membuat diagram energi, membandingkan fase gas dan pelarut, serta menyimpan CSV.

Sintesis Alur Praktikum 7

Praktikum 7 dapat dipahami melalui alur berikut:

```
struktur reaktan dan produk
→ optimasi geometri
→ perhitungan frekuensi
→ energi elektronik
→ ZPE, entalpi, entropi, Gibbs
→ perhitungan  $\Delta E$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ 
→ konversi Hartree ke kJ/mol
→ perbandingan gas dan pelarut
→ diagram energi reaksi
→ analisis termodinamika
```

Alur ini menunjukkan bahwa Praktikum 7 bukan sekadar pengambilan angka energi dari output software. Setiap angka harus melalui proses validasi. Struktur harus dioptimasi. Frekuensi imajiner harus diperiksa. Metode dan basis set harus konsisten. Muatan dan multiplicity harus benar. Model pelarut harus dicatat. Energi harus dikonversi dengan satuan yang tepat. Hasil harus dianalisis dengan teori termodinamika.

Dengan demikian, Praktikum 7 melatih mahasiswa untuk berpikir secara berlapis:

```
data komputasi
→ validasi
→ perhitungan
→ visualisasi
→ interpretasi
→ kritik model
```

Inilah inti literasi kimia komputasi. Mahasiswa tidak cukup mampu menjalankan software; mereka juga harus mampu menjelaskan makna hasilnya.

Makna Sistem Reaksi Model dalam Bab 10

Enam sistem reaksi model dalam Bab 10 dipilih untuk mewakili berbagai persoalan termodinamika.

Isomerisasi cis-trans 2-butena digunakan untuk membandingkan kestabilan isomer. Sistem ini menunjukkan bahwa molekul dengan rumus sama dapat memiliki energi berbeda karena susunan ruang yang berbeda. Trans-2-butena umumnya lebih stabil karena tolakan sterik lebih kecil.

Protonasi amonia digunakan untuk membahas pembentukan spesies bermuatan. NH_3 sebagai basa Lewis menerima proton membentuk NH_4^+ . Sistem ini penting untuk memahami bagaimana pelarut polar dapat menstabilkan ion.

Hidrasi formaldehida digunakan untuk membahas reaksi adisi air pada gugus karbonil. Sistem ini menghubungkan kimia organik, polaritas gugus karbonil, perubahan ikatan, entropi, dan efek pelarut.

Dimer air digunakan untuk memahami ikatan hidrogen dan perbedaan antara ΔE , ΔH , dan ΔG . Dimerisasi dapat menguntungkan secara energi elektronik, tetapi tidak selalu menguntungkan secara Gibbs karena penalti entropi.

Konformer etanol digunakan untuk membandingkan energi relatif konformer akibat rotasi ikatan tunggal. Sistem ini melatih mahasiswa memahami bahwa perbedaan energi kecil tetap bermakna dan harus dihitung dengan hati-hati.

Asam asetat monomer dan dimer digunakan untuk memahami dimerisasi melalui dua ikatan hidrogen. Sistem ini memperlihatkan kompetisi antara keuntungan entalpi dan penalti entropi, serta kemungkinan pengaruh pelarut terhadap monomer dan dimer.

Dengan keenam sistem ini, mahasiswa melihat bahwa energi reaksi bukan konsep abstrak. Energi reaksi menjelaskan fenomena nyata dalam kimia organik, kimia fisik, kimia larutan, dan kimia antarmolekul.

Keterampilan yang Diperoleh Mahasiswa

Setelah menyelesaikan Bab 10, mahasiswa diharapkan memiliki keterampilan berikut:

1. Menyiapkan struktur reaktan dan produk untuk perhitungan energi.
2. Menentukan muatan dan multiplicity yang benar.
3. Menjalankan optimasi geometri sebelum mengambil energi.
4. Menjalankan perhitungan frekuensi untuk memperoleh koreksi termokimia.
5. Memeriksa frekuensi imajiner sebagai validasi struktur minimum.
6. Mengambil energi elektronik dari output software.
7. Mengambil entalpi dan energi bebas Gibbs dari output frekuensi.
8. Menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG berdasarkan stoikiometri reaksi.
9. Mengonversi energi dari Hartree ke kJ/mol.
10. Membandingkan energi fase gas dan pelarut.
11. Menjelaskan pengaruh pelarut terhadap spesies polar atau bermuatan.
12. Membuat diagram energi reaksi.
13. Membuat grafik perbandingan fase gas dan pelarut.
14. Menyimpan tabel hasil dalam CSV.
15. Menulis analisis termodinamika secara kritis dan berbasis data.

Keterampilan tersebut membentuk dasar penting bagi praktikum lanjutan, terutama yang berkaitan dengan mekanisme reaksi, keadaan transisi, energi aktivasi, kesetimbangan, dan studi efek lingkungan yang lebih kompleks.

Keterbatasan Praktikum 7

Bab 10 juga menekankan bahwa hasil komputasi harus ditafsirkan dengan kesadaran keterbatasan.

Pertama, hasil bergantung pada **metode dan basis set**. Perhitungan dengan HF, DFT, atau metode lain dapat menghasilkan energi relatif berbeda. Karena itu, laporan harus selalu mencantumkan level teori yang digunakan.

Kedua, koreksi termokimia dari perhitungan frekuensi umumnya menggunakan pendekatan **osilator harmonik** dan model gas ideal. Pendekatan ini dapat kurang akurat untuk mode frekuensi rendah, rotasi internal, dan sistem fleksibel.

Ketiga, ΔG dari output komputasi bergantung pada **suhu, tekanan, dan keadaan standar**. Jika dibandingkan dengan data eksperimen larutan, koreksi keadaan standar dapat diperlukan.

Keempat, model pelarut kontinu hanya menggambarkan pelarut sebagai **medium dielektrik**, bukan sebagai kumpulan molekul eksplisit. Model ini tidak selalu menangkap ikatan hidrogen spesifik, struktur solvasi, mikrosolvasi, dan dinamika pelarut.

Kelima, sistem protonasi amonia dengan H^+ bebas harus dipahami sebagai **model konseptual**, bukan representasi lengkap proton dalam larutan nyata. Dalam larutan, proton biasanya tersolvasi.

Keenam, diagram energi reaksi dalam Praktikum 7 adalah **diagram termodinamika**, bukan diagram kinetika. Diagram tersebut menunjukkan perbedaan energi reaktan dan produk, bukan energi aktivasi atau mekanisme reaksi.

Dengan memahami keterbatasan tersebut, mahasiswa belajar bersikap ilmiah. Hasil komputasi bukan angka mutlak tanpa konteks, tetapi hasil model yang harus dijelaskan bersama asumsi dan batas validitasnya.

Implikasi Keilmuan Bab 10

Bab 10 memiliki implikasi keilmuan yang luas.

Pertama, bab ini memperlihatkan bahwa kimia komputasi dapat digunakan untuk menjelaskan kestabilan relatif isomer, konformer, produk reaksi, kompleks antarmolekul, dan spesies bermuatan.

Kedua, bab ini menegaskan bahwa termodinamika molekuler tidak dapat dipahami hanya melalui energi elektronik. Entalpi dan entropi harus dipertimbangkan untuk memahami energi bebas Gibbs.

Ketiga, bab ini menunjukkan bahwa pelarut berperan aktif dalam kimia. Pelarut tidak hanya menjadi latar tempat reaksi berlangsung, tetapi dapat mengubah kestabilan relatif dan kecenderungan termodinamika.

Keempat, bab ini memperlihatkan bahwa interaksi antarmolekul seperti ikatan hidrogen harus dianalisis melalui keseimbangan antara entalpi dan entropi. Ikatan hidrogen dapat menurunkan entalpi, tetapi asosiasi molekul dapat menurunkan entropi.

Kelima, bab ini menghubungkan kimia organik, kimia fisik, kimia larutan, dan kimia komputasi dalam satu kerangka praktikum yang utuh.

Implikasi Pedagogis Bab 10

Secara pedagogis, Bab 10 melatih mahasiswa untuk berpikir lebih matang dalam menggunakan software kimia komputasi. Mahasiswa tidak hanya diminta menjalankan perhitungan, tetapi juga diminta memahami struktur logika di balik perhitungan.

Alur berpikir yang dilatih adalah:

apa spesies yang dibandingkan?
 → apa stoikiometrinya?
 → apa energi setiap spesies?
 → apakah struktur valid?
 → apakah metode konsisten?
 → apa nilai ΔE ?
 → apa nilai ΔH ?
 → apa nilai ΔG ?
 → apa pengaruh entropi?
 → apa pengaruh pelarut?
 → apa keterbatasan model?

Alur ini membentuk kebiasaan ilmiah yang penting. Dalam riset kimia komputasi, kesalahan sering terjadi bukan karena software tidak mampu menghitung, tetapi karena pengguna salah menyiapkan sistem, salah mengambil energi, salah membaca output, salah menghitung stoikiometri, atau salah menafsirkan hasil.

Bab 10 menanamkan prinsip bahwa komputasi kimia harus dilakukan dengan disiplin metodologis, ketelitian numerik, dan analisis konseptual.

Arah Menuju Bab Berikutnya

Setelah Bab 10 membahas energi reaksi, termodinamika, dan efek pelarut, pembelajaran dapat dilanjutkan menuju topik yang lebih lanjut. Bab berikutnya dapat diarahkan pada **mekanisme**

reaksi, keadaan transisi, energi aktivasi, koordinat reaksi, atau pemodelan jalur reaksi. Arah ini wajar karena Bab 10 telah memberikan dasar termodinamika, sedangkan kajian reaksi yang lebih lengkap memerlukan analisis kinetika.

Bab 10 menjawab pertanyaan:

produk lebih stabil atau tidak?
reaksi menguntungkan secara Gibbs atau tidak?
pelarut menstabilkan spesies tertentu atau tidak?

Bab berikutnya dapat menjawab pertanyaan:

bagaimana reaksi berlangsung?
berapa energi aktivasinya?
apa struktur keadaan transisinya?
jalur reaksi mana yang paling mungkin?

Dengan demikian, Bab 10 menjadi jembatan antara perhitungan energi relatif dan studi reaksi yang lebih mendalam. Mahasiswa yang telah memahami ΔE , ΔH , ΔG , entropi, dan efek pelarut akan lebih siap mempelajari keadaan transisi dan mekanisme reaksi.

Kesimpulan Umum Bab 10

Bab 10 menegaskan bahwa energi reaksi dalam kimia komputasi harus dianalisis secara hati-hati. ΔE , ΔH , dan ΔG tidak boleh dicampuradukkan. ΔE menunjukkan perubahan energi elektronik. ΔH menunjukkan perubahan entalpi. ΔG menunjukkan kecenderungan termodinamika yang memasukkan kontribusi entropi.

Pelarut dapat mengubah hasil termodinamika dengan menstabilkan spesies polar atau bermuatan. Namun, efek pelarut harus dibaca sebagai stabilisasi relatif antara reaktan dan produk. Model pelarut kontinu sangat berguna untuk pembelajaran dan estimasi awal, tetapi memiliki keterbatasan karena tidak menggambarkan molekul pelarut secara eksplisit.

Dengan menyelesaikan Praktikum 7, mahasiswa diharapkan mampu menghitung energi reaksi, memahami makna entalpi dan energi bebas Gibbs, menafsirkan peran entropi, menjelaskan efek pelarut, serta menyusun analisis termodinamika berbasis data komputasi. Bab ini memperkuat kemampuan mahasiswa untuk membaca output kimia komputasi secara kritis, argumentatif, dan bertanggung jawab.

Daftar Pustaka Bab 10

- Atkins, P., & de Paula, J. (2010). *Atkins' Physical Chemistry* (9th ed.). Oxford University Press.
- Barone, V., & Cossi, M. (1998). Quantum calculation of molecular energies and energy gradients in solution by a conductor solvent model. *The Journal of Physical Chemistry A*, 102(11), 1995–2001.
- Born, M. (1920). Volumen und Hydratationswärme der Ionen. *Zeitschrift für Physik*, 1, 45–48.
- Cances, E., Mennucci, B., & Tomasi, J. (1997). A new integral equation formalism for the polarizable continuum model: Theoretical background and applications to isotropic and anisotropic dielectrics. *The Journal of Chemical Physics*, 107(8), 3032–3041.
- Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). John Wiley & Sons.
- Foresman, J. B., & Frisch, Æ. (2015). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (3rd ed.). Gaussian, Inc.
- Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons.
- Klamt, A., & Schüürmann, G. (1993). COSMO: A new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient. *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2*, 799–805.
- Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Pearson Education.
- Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.
- Lewars, E. G. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (3rd ed.). Springer.
- Marenich, A. V., Cramer, C. J., & Truhlar, D. G. (2009). Universal solvation model based on solute electron density and on a continuum model of the solvent defined by the bulk dielectric constant and atomic surface tensions. *The Journal of Physical Chemistry B*, 113(18), 6378–6396.
- McQuarrie, D. A., & Simon, J. D. (1997). *Physical Chemistry: A Molecular Approach*. University Science Books.
- Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78.
- Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system—Version 5.0. *WIREs Computational Molecular Science*, 12(5), e1606.

Onsager, L. (1936). Electric moments of molecules in liquids. *Journal of the American Chemical Society*, 58(8), 1486–1493.

Parrish, R. M., Burns, L. A., Smith, D. G. A., Simmonett, A. C., DePrince, A. E., Hohenstein, E. G., Bozkaya, U., Sokolov, A. Y., Di Remigio, R., Richard, R. M., Gonthier, J. F., James, A. M., McAlexander, H. R., Kumar, A., Saitow, M., Wang, X., Pritchard, B. P., Verma, P., Schaefer, H. F., Patkowski, K., King, R. A., Valeev, E. F., Evangelista, F. A., Turney, J. M., Crawford, T. D., & Sherrill, C. D. (2017). Psi4 1.1: An open-source electronic structure program emphasizing automation, advanced libraries, and interoperability. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 13(7), 3185–3197.

Schmidt, M. W., Baldridge, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, J. H., Koseki, S., Matsunaga, N., Nguyen, K. A., Su, S., Windus, T. L., Dupuis, M., & Montgomery, J. A. (1993). General atomic and molecular electronic structure system. *Journal of Computational Chemistry*, 14(11), 1347–1363.

Sun, Q., Berkelbach, T. C., Blunt, N. S., Booth, G. H., Guo, S., Li, Z., Liu, J., McClain, J. D., Sayfutyarova, E. R., Sharma, S., Wouters, S., & Chan, G. K.-L. (2018). PySCF: The Python-based simulations of chemistry framework. *WIREs Computational Molecular Science*, 8(1), e1340.

Sun, Q., Zhang, X., Banerjee, S., Bao, P., Barbry, M., Blunt, N. S., Bogdanov, N. A., Booth, G. H., Chen, J., Cui, Z.-H., Eriksen, J. J., Gao, Y., Guo, S., Hermann, J., Hermes, M. R., Koh, K., Koval, P., Lehtola, S., Li, Z., Liu, J., Mardirossian, N., McClain, J. D., Motta, M., Mussard, B., Pham, H. Q., Pulkin, A., Purwanto, W., Robinson, P. J., Ronca, E., Sayfutyarova, E. R., Scheurer, M., Schurkus, H. F., Smith, J. E. T., Sun, C., Sun, S.-N., Upadhyay, S., Wagner, L. K., Wang, X., White, A., Whitfield, J. D., Williamson, M. J., Wouters, S., Yang, J., Yu, J. M., Zhu, T., Berkelbach, T. C., Sharma, S., Sokolov, A. Y., & Chan, G. K.-L. (2020). Recent developments in the PySCF program package. *The Journal of Chemical Physics*, 153(2), 024109.

Tomasi, J., & Persico, M. (1994). Molecular interactions in solution: An overview of methods based on continuous distributions of the solvent. *Chemical Reviews*, 94(7), 2027–2094.

Tomasi, J., Mennucci, B., & Cammi, R. (2005). Quantum mechanical continuum solvation models. *Chemical Reviews*, 105(8), 2999–3094.

Young, D. C. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. John Wiley & Sons.

GLOSARIUM

A

Ab Initio

- **Definisi singkat:** Metode kimia komputasi yang menghitung sifat molekul berdasarkan prinsip mekanika kuantum tanpa parameter empiris utama.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk memperkenalkan perhitungan energi elektronik, struktur molekul, dan sifat kuantum secara lebih mendasar.
- **Padanan asing:** *Ab initio method*.

Akurasi

- **Definisi singkat:** Kedekatan hasil perhitungan dengan nilai benar atau nilai referensi yang dapat dipercaya.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas saat membandingkan metode komputasi, basis set, hasil optimasi, energi, frekuensi, dan data termodinamika.
- **Padanan asing:** *Accuracy*.

Algoritma

- **Definisi singkat:** Urutan langkah logis untuk menyelesaikan persoalan komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam pembahasan Python, pemrosesan data energi, perhitungan ΔE , ΔH , ΔG , dan visualisasi.
- **Padanan asing:** *Algorithm*.

Amanah Ilmiah

- **Definisi singkat:** Tanggung jawab moral untuk menyajikan data, metode, dan kesimpulan secara jujur.
- **Konteks dalam buku:** Berkaitan dengan reproduktibilitas, kejujuran akademik, pelaporan data komputasi, dan penggunaan software secara sah.
- **Padanan asing/Arab:** *Scientific integrity*; Arab: الأمانة العلمية (*al-amānah al-'ilmiyyah*), kejujuran dalam ilmu.

Analisis Data

- **Definisi singkat:** Proses membaca, mengolah, membandingkan, dan menafsirkan data.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan pada pengolahan output komputasi dengan Python, tabel CSV, diagram energi, dan grafik spektrum.
- **Padanan asing:** *Data analysis*.

B

Basis Set

- **Definisi singkat:** Kumpulan fungsi matematika untuk merepresentasikan orbital atom dalam perhitungan kimia kuantum.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas dalam pemilihan level teori seperti STO-3G, 6-31G, 6-31G(d), def2-SVP, dan def2-TZVP.
- **Padanan asing:** *Basis set*.

B3LYP

- **Definisi singkat:** Salah satu fungsional DFT hibrida yang banyak digunakan dalam kimia komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai contoh metode DFT untuk optimasi geometri, energi, frekuensi, dan termodinamika.
- **Padanan asing:** *Becke, three-parameter, Lee–Yang–Parr functional*.

Bilangan Gelombang

- **Definisi singkat:** Besaran yang menyatakan jumlah gelombang per satuan panjang, lazim digunakan dalam spektrum IR.
- **Konteks dalam buku:** Dipakai untuk membaca posisi puncak vibrasi molekul pada spektrum inframerah.
- **Padanan asing:** *Wavenumber*.

Born–Oppenheimer

- **Definisi singkat:** Aproksimasi yang memisahkan gerak inti dan elektron karena massa inti jauh lebih besar daripada elektron.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi dasar perhitungan struktur elektronik, optimasi geometri, dan energi potensial molekul.
- **Padanan asing:** *Born–Oppenheimer approximation*.

C

ChemCompute

- **Definisi singkat:** Platform berbasis web untuk menjalankan perhitungan kimia komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai jalur praktikum untuk optimasi geometri, frekuensi, energi, dan termodinamika.
- **Padanan asing:** *ChemCompute platform*.

CSV

- **Definisi singkat:** Format file teks bertabel yang memisahkan data dengan koma.
- **Konteks dalam buku:** Dipakai untuk menyimpan data energi, hasil ΔE , ΔH , ΔG , spektrum IR, dan output analisis Python.
- **Padanan asing:** *Comma-Separated Values*.

Conformer

- **Definisi singkat:** Bentuk molekul yang berbeda akibat rotasi ikatan tunggal tanpa memutus ikatan kovalen.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas pada konformer etanol untuk membandingkan kestabilan relatif berdasarkan energi.
- **Padanan asing:** *Conformer*.

COSMO

- **Definisi singkat:** Model pelarut kontinu yang memperlakukan pelarut sebagai medium dielektrik untuk menyaring interaksi elektrostatik.
- **Konteks dalam buku:** Dikenalkan sebagai salah satu pendekatan efek pelarut dalam perhitungan energi.
- **Padanan asing:** *Conductor-like Screening Model*.

CPCM

- **Definisi singkat:** Varian model pelarut kontinu yang mirip COSMO dan digunakan dalam beberapa paket kimia komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Disebut dalam pembahasan model pelarut untuk membandingkan fase gas dan pelarut.
- **Padanan asing:** *Conductor-like Polarizable Continuum Model*.

D

DFT

- **Definisi singkat:** Metode kimia kuantum yang menghitung sifat sistem berdasarkan kerapatan elektron.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk optimasi geometri, energi elektronik, HOMO-LUMO, frekuensi, dan termodinamika.
- **Padanan asing:** *Density Functional Theory*.

Diagram Energi

- **Definisi singkat:** Visualisasi perbedaan energi relatif antara reaktan dan produk atau antarspesies.

- **Konteks dalam buku:** Digunakan pada Praktikum 7 untuk menampilkan ΔG reaksi secara visual.
- **Padanan asing:** *Energy diagram*.

Dimer

- **Definisi singkat:** Kompleks yang terbentuk dari dua molekul sejenis atau berbeda.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan pada dimer air dan dimer asam asetat untuk menganalisis ikatan hidrogen, entalpi, dan entropi.
- **Padanan asing:** *Dimer*.

Dimerisasi

- **Definisi singkat:** Proses pembentukan dimer dari dua monomer.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas pada air dan asam asetat untuk menunjukkan perbedaan ΔE , ΔH , dan ΔG .
- **Padanan asing:** *Dimerization*.

Dipol

- **Definisi singkat:** Pemisahan muatan parsial positif dan negatif dalam molekul.
- **Konteks dalam buku:** Berkaitan dengan momen dipol, polaritas molekul, dan stabilisasi oleh pelarut.
- **Padanan asing:** *Dipole*.

E

Efek Pelarut

- **Definisi singkat:** Pengaruh lingkungan pelarut terhadap energi, struktur, kestabilan, atau reaktivitas molekul.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas pada perbandingan fase gas dan pelarut dalam analisis energi reaksi.
- **Padanan asing:** *Solvent effect*.

Energi Bebas Gibbs

- **Definisi singkat:** Besaran termodinamika untuk menilai kecenderungan proses pada suhu dan tekanan tetap.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menghitung ΔG dan menilai kestabilan termodinamika reaktan-produk.
- **Padanan asing:** *Gibbs free energy*.

Energi Elektronik

- **Definisi singkat:** Energi yang diperoleh dari perhitungan struktur elektronik molekul pada geometri tertentu.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi dasar perhitungan ΔE dalam analisis energi reaksi.
- **Padanan asing:** *Electronic energy*.

Entalpi

- **Definisi singkat:** Besaran termodinamika yang berkaitan dengan panas reaksi pada tekanan tetap.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menghitung ΔH dari output termokimia.
- **Padanan asing:** *Enthalpy*.

Entropi

- **Definisi singkat:** Besaran yang berkaitan dengan jumlah keadaan mikro dan derajat kebebasan sistem.
- **Konteks dalam buku:** Menjelaskan mengapa ΔG dapat berbeda dari ΔH , terutama pada dimerisasi.
- **Padanan asing:** *Entropy*.

F

Fase Gas

- **Definisi singkat:** Kondisi perhitungan molekul tanpa lingkungan pelarut eksplisit maupun kontinu.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai pembandingan terhadap perhitungan dengan model pelarut.
- **Padanan asing:** *Gas phase*.

File Input

- **Definisi singkat:** File yang berisi struktur molekul, metode, basis set, muatan, multiplicity, dan instruksi perhitungan.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan pada jalur ORCA, Gaussian, GAMESS, Psi4, PySCF, dan ChemCompute.
- **Padanan asing:** *Input file*.

File Output

- **Definisi singkat:** File hasil perhitungan yang memuat energi, geometri, frekuensi, status optimasi, dan data termokimia.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi sumber data untuk analisis Python dan laporan praktikum.

- **Padanan asing:** *Output file.*

Frekuensi Imajiner

- **Definisi singkat:** Frekuensi bernilai imajiner yang menunjukkan struktur belum merupakan minimum atau dapat menunjukkan keadaan transisi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk validasi hasil optimasi geometri dan perhitungan frekuensi.
- **Padanan asing:** *Imaginary frequency.*

Frekuensi Vibrasi

- **Definisi singkat:** Frekuensi gerakan periodik atom-atom dalam molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk simulasi spektrum IR, ZPE, entalpi, entropi, dan Gibbs.
- **Padanan asing:** *Vibrational frequency.*

G

GAMESS

- **Definisi singkat:** Paket program kimia kuantum untuk perhitungan struktur elektronik molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai salah satu software untuk energi, optimasi, dan frekuensi.
- **Padanan asing:** *General Atomic and Molecular Electronic Structure System.*

Gaussian

- **Definisi singkat:** Paket kimia komputasi untuk perhitungan struktur elektronik, optimasi, frekuensi, dan sifat molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai contoh software profesional dalam praktikum kimia komputasi.
- **Padanan asing:** *Gaussian software.*

GaussView

- **Definisi singkat:** Antarmuka visual untuk membangun struktur molekul dan membaca output Gaussian.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menyiapkan struktur, memeriksa geometri, dan membantu visualisasi hasil.
- **Padanan asing:** *GaussView.*

Geometri Molekul

- **Definisi singkat:** Susunan ruang atom-atom dalam molekul.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi dasar optimasi, analisis energi, momen dipol, vibrasi, dan sifat molekul.
- **Padanan asing:** *Molecular geometry*.

Grafik Perbandingan

- **Definisi singkat:** Visualisasi data untuk membandingkan dua atau lebih kondisi atau sistem.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk membandingkan ΔG fase gas dan pelarut.
- **Padanan asing:** *Comparison graph*.

H

Hartree

- **Definisi singkat:** Satuan energi atomik yang lazim digunakan dalam kimia kuantum.
- **Konteks dalam buku:** Energi output dikonversi dari Hartree ke kJ/mol untuk interpretasi kimia.
- **Padanan asing:** *Hartree*.

HF

- **Definisi singkat:** Metode kimia kuantum yang mendekati fungsi gelombang banyak elektron melalui satu determinan Slater.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai metode dasar untuk memperkenalkan perhitungan struktur elektronik.
- **Padanan asing:** *Hartree–Fock*.

Hidrasi

- **Definisi singkat:** Reaksi penambahan air pada suatu molekul atau spesies.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas pada hidrasi formaldehida menjadi metanadiol.
- **Padanan asing:** *Hydration*.

HOMO

- **Definisi singkat:** Orbital molekul terisi tertinggi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menganalisis reaktivitas, donor elektron, dan sifat elektronik molekul.
- **Padanan asing:** *Highest Occupied Molecular Orbital*.

Hukum Termodinamika

- **Definisi singkat:** Prinsip dasar yang mengatur energi, panas, kerja, entropi, dan kesetimbangan.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi landasan pembahasan entalpi, entropi, dan energi bebas Gibbs.
- **Padanan asing:** *Laws of thermodynamics*.

I

Ikatan Hidrogen

- **Definisi singkat:** Interaksi antarmolekul antara atom H yang terikat pada atom elektronegatif dengan pasangan elektron atom elektronegatif lain.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas pada dimer air dan dimer asam asetat.
- **Padanan asing:** *Hydrogen bond*.

Ikhtiar Ilmiah

- **Definisi singkat:** Upaya sistematis dan bertanggung jawab dalam mencari pengetahuan.
- **Konteks dalam buku:** Berkaitan dengan proses praktikum, validasi hasil, dan sikap teliti dalam komputasi.
- **Padanan asing/Arab:** Arab: اختيار/اجتهاد علمي (*ikhtiyār/ijtihād ‘ilmī*), usaha ilmiah yang sungguh-sungguh.

Input Energi

- **Definisi singkat:** Data energi reaktan dan produk yang dimasukkan ke dalam kode Python.
- **Konteks dalam buku:** Dipakai untuk menghitung ΔE , ΔH , ΔG , dan grafik energi.
- **Padanan asing:** *Energy input*.

Intensitas IR

- **Definisi singkat:** Ukuran kekuatan serapan inframerah pada mode vibrasi tertentu.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam analisis spektrum IR komputasi.
- **Padanan asing:** *IR intensity*.

Isomerisasi

- **Definisi singkat:** Perubahan satu isomer menjadi isomer lain dengan rumus molekul sama tetapi susunan berbeda.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas pada isomerisasi cis-trans 2-butena.
- **Padanan asing:** *Isomerization*.

J

Jalur ChemCompute

- **Definisi singkat:** Alur praktikum berbasis platform ChemCompute untuk menghitung energi dan termokimia.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan pada Praktikum 7 untuk memperoleh energi reaktan dan produk.
- **Padanan asing:** *ChemCompute workflow*.

Jalur Python Mandiri

- **Definisi singkat:** Alur pengolahan data menggunakan Python secara lokal atau mandiri.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menghitung selisih energi, konversi satuan, dan visualisasi hasil.
- **Padanan asing:** *Independent Python workflow*.

Job Komputasi

- **Definisi singkat:** Jenis tugas perhitungan yang dijalankan oleh software kimia komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Mencakup optimasi, frekuensi, single point, optimasi-frekuensi, dan analisis sifat molekul.
- **Padanan asing:** *Computational job*.

Jarak Ikatan

- **Definisi singkat:** Jarak antara dua atom yang berikatan dalam molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam analisis geometri hasil optimasi.
- **Padanan asing:** *Bond length*.

K

Kestabilan Molekul

- **Definisi singkat:** Kecenderungan suatu molekul memiliki energi lebih rendah dibanding bentuk atau spesies lain.
- **Konteks dalam buku:** Dibahas melalui energi isomer, konformer, produk reaksi, dan dimer.
- **Padanan asing:** *Molecular stability*.

Koefisien Stoikiometri

- **Definisi singkat:** Angka yang menunjukkan jumlah relatif spesies dalam reaksi kimia.
- **Konteks dalam buku:** Penting dalam perhitungan ΔE , ΔH , dan ΔG , terutama pada dimerisasi.

- **Padanan asing:** *Stoichiometric coefficient*.

Konstanta Dielektrik

- **Definisi singkat:** Ukuran kemampuan medium untuk meredam interaksi elektrostatik.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menjelaskan stabilisasi ion oleh pelarut polar.
- **Padanan asing:** *Dielectric constant*.

Konvergensi

- **Definisi singkat:** Kondisi ketika perhitungan telah memenuhi kriteria numerik yang ditetapkan.
- **Konteks dalam buku:** Diperiksa pada optimasi geometri dan iterasi energi elektronik.
- **Padanan asing:** *Convergence*.

Koreksi Termal

- **Definisi singkat:** Koreksi energi yang berasal dari kontribusi translasi, rotasi, vibrasi, dan suhu.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk memperoleh entalpi dan Gibbs dari output frekuensi.
- **Padanan asing:** *Thermal correction*.

L

Level Teori

- **Definisi singkat:** Kombinasi metode dan basis set yang digunakan dalam perhitungan kimia komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Harus konsisten saat membandingkan energi reaktan dan produk.
- **Padanan asing:** *Level of theory*.

Literasi Komputasi

- **Definisi singkat:** Kemampuan memahami, menjalankan, mengelola, dan menafsirkan proses komputasi secara benar.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi tujuan pembelajaran praktikum berbasis software dan Python.
- **Padanan asing:** *Computational literacy*.

LUMO

- **Definisi singkat:** Orbital molekul kosong terendah.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menganalisis akseptor elektron dan reaktivitas molekul.

- **Padanan asing:** *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*.

Larutan

- **Definisi singkat:** Sistem homogen yang terdiri atas zat terlarut dan pelarut.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi konteks pembahasan efek pelarut dan model pelarut kontinu.
- **Padanan asing:** *Solution*.

M

Matplotlib

- **Definisi singkat:** Pustaka Python untuk membuat grafik dan visualisasi data.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk membuat diagram energi, grafik spektrum IR, dan grafik perbandingan.
- **Padanan asing:** *Matplotlib*.

Metode Semiempiris

- **Definisi singkat:** Metode komputasi yang menyederhanakan persamaan kuantum dengan bantuan parameter empiris.
- **Konteks dalam buku:** Diperkenalkan sebagai metode cepat untuk sistem molekul tertentu.
- **Padanan asing:** *Semiempirical method*.

Model Pelarut Kontinu

- **Definisi singkat:** Model yang menggambarkan pelarut sebagai medium homogen dengan sifat dielektrik.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menganalisis efek pelarut pada spesies polar dan bermuatan.
- **Padanan asing:** *Continuum solvation model*.

Momen Dipol

- **Definisi singkat:** Ukuran polaritas molekul akibat pemisahan muatan.
- **Konteks dalam buku:** Dipakai untuk menjelaskan polaritas, interaksi pelarut, dan sifat molekul.
- **Padanan asing:** *Dipole moment*.

Multiplicity

- **Definisi singkat:** Besaran yang berhubungan dengan jumlah elektron tidak berpasangan dalam sistem.
 - **Konteks dalam buku:** Harus ditentukan dengan benar dalam input perhitungan.
 - **Padanan asing:** *Spin multiplicity*.
-

N

Normal Mode

- **Definisi singkat:** Pola gerak vibrasi kolektif atom-atom dalam molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk memahami frekuensi vibrasi dan spektrum IR.
- **Padanan asing:** *Normal mode*.

NH₄⁺

- **Definisi singkat:** Ion amonium bermuatan positif.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai contoh spesies bermuatan yang distabilkan oleh pelarut polar.
- **Padanan asing:** *Ammonium ion*.

Numerik

- **Definisi singkat:** Berkaitan dengan angka, perhitungan, dan proses kuantitatif.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam perhitungan energi, optimasi, konversi satuan, dan pengolahan data.
- **Padanan asing:** *Numerical*.

Nukleofil

- **Definisi singkat:** Spesies kaya elektron yang dapat menyerang pusat elektrofilik.
 - **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam pembahasan hidrasi formaldehida oleh air.
 - **Padanan asing:** *Nucleophile*.
-

O

Optimasi Geometri

- **Definisi singkat:** Proses mencari susunan atom dengan energi minimum.
- **Konteks dalam buku:** Langkah wajib sebelum mengambil energi untuk analisis reaksi dan sifat molekul.
- **Padanan asing:** *Geometry optimization*.

ORCA

- **Definisi singkat:** Paket program kimia kuantum untuk perhitungan DFT, energi, frekuensi, dan sifat molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai salah satu software utama praktikum.
- **Padanan asing:** *ORCA quantum chemistry program*.

Orbital Molekul

- **Definisi singkat:** Fungsi matematika yang menggambarkan distribusi elektron dalam molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam analisis HOMO-LUMO, ikatan, dan reaktivitas.
- **Padanan asing:** *Molecular orbital*.

Osilator Harmonik

- **Definisi singkat:** Model ideal gerak vibrasi yang digunakan untuk menghitung frekuensi molekul.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi dasar perhitungan frekuensi, ZPE, dan koreksi termokimia.
- **Padanan asing:** *Harmonic oscillator*.

Output Praktikum

- **Definisi singkat:** Hasil akhir berupa tabel, grafik, CSV, diagram, dan laporan.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai bukti analisis komputasi yang dapat diverifikasi.
- **Padanan asing:** *Practicum output*.

P

Pandas

- **Definisi singkat:** Pustaka Python untuk pengolahan data berbentuk tabel.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk membaca CSV, menghitung ΔE , ΔH , ΔG , dan menyimpan hasil.
- **Padanan asing:** *Pandas*.

PCM

- **Definisi singkat:** Model pelarut kontinu yang memodelkan pelarut sebagai medium terpolarisasi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menjelaskan efek pelarut terhadap energi molekul.
- **Padanan asing:** *Polarizable Continuum Model*.

Pelarut Eksplisit

- **Definisi singkat:** Pendekatan yang memasukkan molekul pelarut satu per satu dalam model komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Dibandingkan dengan model pelarut kontinu dalam pembahasan keterbatasan solvasi.
- **Padanan asing:** *Explicit solvent*.

Pelarut Polar

- **Definisi singkat:** Pelarut yang memiliki momen dipol besar atau konstanta dielektrik tinggi.
- **Konteks dalam buku:** Menstabilkan spesies polar dan bermuatan seperti NH_4^+ .
- **Padanan asing:** *Polar solvent*.

Psi4

- **Definisi singkat:** Paket kimia kuantum terbuka yang dapat diintegrasikan dengan Python.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan sebagai salah satu jalur perhitungan energi elektronik.
- **Padanan asing:** *Psi4*.

PySCF

- **Definisi singkat:** Pustaka Python untuk simulasi kimia kuantum berbasis struktur elektronik.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk memperkenalkan komputasi kimia berbasis kode.
- **Padanan asing:** *Python-based Simulations of Chemistry Framework*.

Python

- **Definisi singkat:** Bahasa pemrograman yang banyak digunakan untuk analisis data dan komputasi ilmiah.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menghitung, memvisualisasikan, dan menyimpan hasil praktikum.
- **Padanan asing:** *Python programming language*.

Q

Quantum Chemistry

- **Definisi singkat:** Cabang kimia yang menerapkan mekanika kuantum untuk memahami struktur dan sifat molekul.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi fondasi teori perhitungan energi elektronik, orbital, dan frekuensi.
- **Padanan asing:** *Quantum chemistry*.

Quantum Mechanics

- **Definisi singkat:** Teori fisika yang menjelaskan perilaku partikel mikroskopik seperti elektron dan inti atom.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi dasar metode ab initio, Hartree-Fock, DFT, dan perhitungan struktur elektronik.
- **Padanan asing:** *Quantum mechanics*.

Quasi-Newton

- **Definisi singkat:** Keluarga metode numerik untuk optimasi yang memperkirakan informasi kelengkungan fungsi.
- **Konteks dalam buku:** Relevan dalam optimasi geometri molekul oleh software komputasi.
- **Padanan asing:** *Quasi-Newton method*.

QSAR

- **Definisi singkat:** Pendekatan yang menghubungkan struktur kimia dengan aktivitas atau sifat molekul secara kuantitatif.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam pembahasan sifat molekul dan analisis berbasis deskriptor.
- **Padanan asing:** *Quantitative Structure–Activity Relationship*.

R

Reaktan

- **Definisi singkat:** Spesies awal dalam suatu reaksi kimia.
- **Konteks dalam buku:** Energinya dibandingkan dengan produk untuk menghitung ΔE , ΔH , dan ΔG .
- **Padanan asing:** *Reactant*.

Reprodusibilitas

- **Definisi singkat:** Kemampuan menghasilkan ulang hasil yang sama dari data, metode, dan kode yang sama.
- **Konteks dalam buku:** Ditekankan melalui penyimpanan input, output, CSV, kode Python, dan laporan.
- **Padanan asing:** *Reproducibility*.

Rotasi Ikatan

- **Definisi singkat:** Perputaran atom atau gugus atom di sekitar ikatan tunggal.
- **Konteks dalam buku:** Menjelaskan terbentuknya konformer etanol.

- **Padanan asing:** *Bond rotation*.

Rongga Pelarut

- **Definisi singkat:** Ruang imajiner yang ditempati zat terlarut dalam model pelarut kontinu.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menjelaskan cara PCM, CPCM, COSMO, dan SMD memodelkan pelarut.
- **Padanan asing:** *Solvent cavity*.

S

SCF

- **Definisi singkat:** Prosedur iteratif untuk memperoleh solusi medan rata-rata elektron secara konsisten.
- **Konteks dalam buku:** Muncul dalam output energi elektronik seperti SCF energy.
- **Padanan asing:** *Self-Consistent Field*.

SMD

- **Definisi singkat:** Model solvasi universal berbasis kerapatan elektron dan parameter pelarut.
- **Konteks dalam buku:** Dikenalkan sebagai model pelarut kontinu modern.
- **Padanan asing:** *Solvation Model based on Density*.

Spektrum IR

- **Definisi singkat:** Spektrum serapan inframerah yang berkaitan dengan vibrasi molekul.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan pada praktikum frekuensi vibrasi dan analisis gugus fungsi.
- **Padanan asing:** *Infrared spectrum*.

Spontanitas

- **Definisi singkat:** Kecenderungan proses berlangsung secara termodinamika berdasarkan tanda ΔG .
- **Konteks dalam buku:** Dibahas melalui hubungan $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$.
- **Padanan asing:** *Spontaneity*.

Stoikiometri

- **Definisi singkat:** Perbandingan kuantitatif spesies dalam reaksi kimia.
- **Konteks dalam buku:** Menentukan cara menghitung energi total reaktan dan produk.
- **Padanan asing:** *Stoichiometry*.

Subhanahu wa Ta'ala

- **Definisi singkat:** Ungkapan penghormatan kepada Allah yang berarti “Mahasuci dan Mahatinggi Dia”.
- **Konteks dalam buku:** Dapat muncul dalam kata pengantar atau bagian bernuansa religius.
- **Padanan asing/Arab:** Arab: *سبحانه وتعالى* (*subhānahu wa ta'ālā*).

T

Tadabbur

- **Definisi singkat:** Perenungan mendalam terhadap tanda-tanda ilmu dan kebesaran Allah.
- **Konteks dalam buku:** Relevan jika buku mengaitkan ketelitian ilmiah dengan kesadaran spiritual penulis.
- **Padanan asing/Arab:** Arab: *تدبر* (*tadabbur*), perenungan mendalam.

Termodinamika

- **Definisi singkat:** Cabang ilmu yang mempelajari energi, panas, kerja, entropi, dan kesetimbangan.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi dasar analisis ΔH , ΔS , dan ΔG .
- **Padanan asing:** *Thermodynamics*.

Tingkat Energi

- **Definisi singkat:** Nilai energi relatif suatu keadaan molekul atau sistem.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam diagram energi dan analisis kestabilan.
- **Padanan asing:** *Energy level*.

Transisi

- **Definisi singkat:** Perubahan dari satu keadaan ke keadaan lain.
- **Konteks dalam buku:** Dapat merujuk pada perubahan struktur, energi, atau tahap pembelajaran antarpraktikum.
- **Padanan asing:** *Transition*.

Tsiqah Ilmiah

- **Definisi singkat:** Kepercayaan atau kredibilitas ilmiah yang dibangun melalui kejujuran dan ketelitian.
- **Konteks dalam buku:** Berkaitan dengan validasi data, konsistensi metode, dan reproduisibilitas.
- **Padanan asing/Arab:** Arab: *ثقة علمية* (*tsiqah 'ilmiyyah*), kredibilitas ilmiah.

U

UFF

- **Definisi singkat:** Medan gaya umum untuk optimasi struktur molekul berdasarkan mekanika molekuler.
- **Konteks dalam buku:** Dapat digunakan untuk pembuatan struktur awal sebelum perhitungan kuantum.
- **Padanan asing:** *Universal Force Field*.

Unit Konversi

- **Definisi singkat:** Proses mengubah satuan dari bentuk satu ke bentuk lain.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk mengubah Hartree menjadi kJ/mol.
- **Padanan asing:** *Unit conversion*.

Unsur

- **Definisi singkat:** Zat murni yang terdiri atas atom dengan nomor atom sama.
- **Konteks dalam buku:** Menjadi komponen dasar penyusun molekul dalam struktur kimia komputasi.
- **Padanan asing:** *Element*.

Usaha Ilmiah

- **Definisi singkat:** Proses terencana untuk memperoleh, menguji, dan menjelaskan pengetahuan.
- **Konteks dalam buku:** Berkaitan dengan sikap teliti, metodologis, dan bertanggung jawab dalam praktikum.
- **Padanan asing:** *Scientific effort*.

V

Validasi

- **Definisi singkat:** Proses memastikan data, struktur, atau hasil perhitungan layak digunakan.
- **Konteks dalam buku:** Meliputi pemeriksaan konvergensi, frekuensi imajiner, metode, basis set, dan satuan.
- **Padanan asing:** *Validation*.

Vibrasi Molekul

- **Definisi singkat:** Gerakan periodik atom-atom dalam molekul di sekitar posisi kesetimbangan.

- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam analisis IR, ZPE, entalpi, entropi, dan Gibbs.
- **Padanan asing:** *Molecular vibration*.

Visualisasi

- **Definisi singkat:** Penyajian data atau struktur dalam bentuk gambar, grafik, atau diagram.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk struktur molekul, orbital, spektrum IR, diagram energi, dan grafik perbandingan.
- **Padanan asing:** *Visualization*.

Volume Rongga

- **Definisi singkat:** Ukuran ruang yang ditempati zat terlarut dalam model pelarut kontinu.
- **Konteks dalam buku:** Berkaitan dengan cara model solvasi menghitung interaksi pelarut-zat terlarut.
- **Padanan asing:** *Cavity volume*.

W

Workflow

- **Definisi singkat:** Urutan kerja sistematis dari input hingga output.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menjelaskan alur ChemCompute, Python, optimasi, frekuensi, dan analisis energi.
- **Padanan asing:** *Workflow*.

Wavenumber

- **Definisi singkat:** Istilah asing untuk bilangan gelombang, biasanya dalam satuan cm^{-1} .
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam pembacaan spektrum IR komputasi.
- **Padanan asing:** *Wavenumber*.

Windows

- **Definisi singkat:** Sistem operasi yang dapat digunakan untuk menjalankan Python, software kimia, dan pengelolaan file praktikum.
- **Konteks dalam buku:** Relevan dalam instruksi menjalankan file `.py`, folder data, dan output praktikum.
- **Padanan asing:** *Microsoft Windows*.

WSL

- **Definisi singkat:** Lingkungan Linux di dalam Windows untuk menjalankan aplikasi dan komputasi berbasis Linux.

- **Konteks dalam buku:** Dapat digunakan untuk menjalankan software kimia komputasi dan skrip Python.
 - **Padanan asing:** *Windows Subsystem for Linux*.
-

X

XYZ

- **Definisi singkat:** Format file sederhana yang menyimpan jumlah atom, nama molekul, dan koordinat atom.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk struktur awal molekul dalam praktikum kimia komputasi.
- **Padanan asing:** *XYZ coordinate file*.

XTB

- **Definisi singkat:** Metode semiempiris modern untuk perhitungan struktur dan energi molekul secara cepat.
- **Konteks dalam buku:** Relevan sebagai alternatif metode cepat untuk optimasi atau eksplorasi struktur.
- **Padanan asing:** *Extended tight binding*.

X-Axis

- **Definisi singkat:** Sumbu horizontal pada grafik.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam grafik spektrum IR, diagram energi, dan perbandingan data.
- **Padanan asing:** *X-axis*.

XML

- **Definisi singkat:** Format markup untuk menyimpan dan menukar data terstruktur.
 - **Konteks dalam buku:** Relevan sebagai contoh format data teknis, meskipun CSV lebih banyak digunakan dalam praktikum.
 - **Padanan asing:** *Extensible Markup Language*.
-

Y

Yield Komputasi

- **Definisi singkat:** Istilah kontekstual untuk keluaran atau hasil yang diperoleh dari suatu proses komputasi.
- **Konteks dalam buku:** Mengacu pada tabel, grafik, energi, atau file hasil analisis.
- **Padanan asing:** *Computational yield/output*.

Y-Axis

- **Definisi singkat:** Sumbu vertikal pada grafik.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan untuk menampilkan intensitas IR, energi relatif, atau nilai ΔG .
- **Padanan asing:** *Y-axis*.

Yang–Parr

- **Definisi singkat:** Bagian dari nama fungsional korelasi Lee–Yang–Parr dalam metode B3LYP.
- **Konteks dalam buku:** Muncul saat membahas metode DFT B3LYP.
- **Padanan asing:** *Yang–Parr correlation functional*.

YAML

- **Definisi singkat:** Format data terstruktur yang mudah dibaca manusia.
- **Konteks dalam buku:** Relevan sebagai contoh format konfigurasi komputasi, meskipun praktikum lebih menekankan CSV dan file input.
- **Padanan asing:** *YAML Ain't Markup Language*.

Z

Zero-Point Energy

- **Definisi singkat:** Energi vibrasi minimum yang tetap dimiliki molekul pada keadaan dasar kuantum.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam koreksi energi elektronik menuju analisis termokimia.
- **Padanan asing:** *Zero-point energy, ZPE*.

ZPE

- **Definisi singkat:** Singkatan dari zero-point energy.
- **Konteks dalam buku:** Diperoleh dari perhitungan frekuensi dan digunakan dalam analisis energi terkoreksi.
- **Padanan asing:** *ZPE*.

Zat Terlarut

- **Definisi singkat:** Spesies kimia yang dilarutkan dalam pelarut.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan dalam pembahasan model pelarut kontinu dan efek pelarut.

- **Padanan asing:** *Solute*.

Zona Energi

- **Definisi singkat:** Wilayah nilai energi relatif dalam diagram atau analisis energi.
- **Konteks dalam buku:** Digunakan secara konseptual untuk membaca posisi reaktan dan produk dalam diagram energi.
- **Padanan asing:** *Energy region*.

- KASMUI -
Dosen Kimia, Komputasi, IT, AI UNNES

<https://hisabmu.com/>
<https://kasmui.cloud/>

Ketua PCM Gunungpati 2	Anggota Majelis Tabligh PDM Kota Semarang & PWM Jawa Tengah	Tim Pengembang Software KHGT MTT PP Muhammadiyah	Praktisi Ilmu Falak

Semarang, Juni 2026

Penulis,

Kasmui

PRAKTIKUM KIMIA KUANTUM

Bagian 2: Materi Praktikum@

SINOPSIS

Buku Praktikum Kimia Kuantum Bagian 2: Materi Praktikum@ dirancang sebagai panduan praktis bagi mahasiswa dan dosen dalam memahami serta menerapkan konsep-konsep kimia kuantum melalui serangkaian kegiatan praktikum berbasis komputasi dan analisis data.

Buku ini menyajikan materi praktikum yang disusun secara sistematis, mulai dari dasar teori singkat, tujuan percobaan, alat dan perangkat lunak yang digunakan, langkah kerja, hingga analisis hasil dan pertanyaan diskusi. Topik-topik yang dibahas meliputi struktur elektronik, energi molekul, spektrum, reaktivitas, serta interaksi molekul dengan pendekatan kuantum menggunakan berbagai metode dan program komputasi modern.

Dengan pendekatan aplikatif, buku ini membantu pembaca mengembangkan keterampilan berpikir kritis, ketelitian dalam analisis, serta kemampuan memecahkan masalah kimia secara kuantum.

Buku ini sangat cocok digunakan sebagai buku pegangan praktikum mata kuliah Kimia Kuantum di tingkat sarjana maupun pascasarjana, dan juga sebagai referensi bagi peneliti pemula yang ingin memperdalam kajian kimia komputasi.

- ✓ Materi praktikum terstruktur dan aplikatif
- 💻 Menggunakan pendekatan komputasi modern
- 🔍 Latihan analisis data dan interpretasi hasil
- 👤 Mendukung pembelajaran mandiri dan kolaboratif
- 📖 Cocok untuk mahasiswa dan peneliti



PRAKTIKUM KIMIA Kuantum

Bagian 2: Materi Praktikum@

KASMUI

PRAKTIKUM KIMIA KUANTUM

Bagian 2: Materi Praktikum@

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}$$

$$\Psi(r,t) = \psi(r)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\hat{H}\phi_i = \epsilon_i\phi_i$$



KASMUI