

Modul Kimia Komputasi

**dalam Workshop Aplikasi Kimia Komputasi pada
Pembelajaran Struktur dan Energetika Molekul
Bandung, 23 November 2019**

**“Penggunaan Perangkat Lunak Avogadro dan Orca
untuk Pemodelan Molekul Sederhana: Penentuan
Panjang Ikatan, Sudut Ikatan, serta ΔH Reaksi”**

Tim Penyusun:

Dr. Atthar Luqman Ivansyah, M.Si

Citra Deliana Dewi Sundari, M.Si

DAFTAR ISI

Pendahuluan Kimia Komputasi	1
Struktur dan Energetika Molekul	2
Modul Praktikum.....	3
I Pembuatan struktur molekul dengan Avogadro.....	5
II Instalasi dan penyiapan <i>input file</i> Orca.....	8
III <i>Submit</i> perhitungan dan komputasi Orca	13
IV Penentuan Panjang Ikatan dan Sudut Ikatan.....	27
V Penentuan ΔH° Reaksi	30

Aplikasi Kimia Komputasi pada Struktur dan Energetika Molekul

A. Pendahuluan Kimia Komputasi

Kimia komputasi merupakan salah satu cabang kimia yang memanfaatkan simulasi komputer untuk membantu menyelesaikan permasalahan kimia. Kimia komputasi menggunakan metode kimia teori yang dikemas dalam suatu program komputer/perangkat lunak yang efisien untuk menghitung struktur serta sifat-sifat senyawa kimia berupa molekul maupun padatan. Hasil perhitungan komputasi dapat melengkapi data eksperimen, memberikan prediksi karakteristik suatu zat atau fenomena, maupun membantu dalam pembelajaran kimia. Kimia komputasi banyak digunakan untuk mendesain obat maupun material baru. Beberapa besaran/karakteristik yang dapat dihitung menggunakan kimia komputasi antara lain energi (interaksi) absolut maupun relatif, distribusi kerapatan muatan elektron, momen dipol, frekuensi vibrasi (spektrum infra merah), energi eksitasi elektron (spektrum UV/Vis), dan lain-lain.

Metode yang dapat digunakan dalam kimia komputasi mencakup situasi statik maupun dinamik. Waktu perhitungan dan sumber daya komputer yang dibutuhkan akan meningkat seiring peningkatan ukuran sistem yang dikaji. Sistem tersebut dapat berupa suatu molekul, kelompok molekul, ataupun padatan. Metode kimia komputasi memiliki akurasi yang bervariasi, dari yang sangat akurat hingga yang bersifat perkiraan kasar. Perhitungan yang sangat akurat biasanya digunakan untuk sistem berukuran kecil. Metode *ab initio* didasarkan sepenuhnya pada mekanika kuantum dan konstanta fisis dasar, sedangkan metode lainnya yaitu metode semiempiris menggunakan tambahan parameter empiris (eksperimen).

Penggunaan metode kimia komputasi saat ini tidak hanya terbatas untuk penelitian, tetapi telah banyak digunakan sebagai alat bantu pembelajaran baik untuk jenjang universitas maupun sekolah menengah. Gambar 1 memperlihatkan salah satu aplikasi kimia komputasi dalam pembelajaran di sekolah menengah yang dipublish pada *Journal of Chemical Education* tahun 2014.

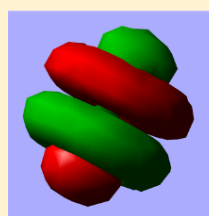
Using Computational Chemistry Activities To Promote Learning and Retention in a Secondary School General Chemistry Setting

Joseph W. Ochterski

East Hampton High School, East Hampton, Connecticut 06424 United States

Supporting Information

ABSTRACT: This article describes the results of using state-of-the-art, research-quality software as a learning tool in a general chemistry secondary school classroom setting. I present three activities designed to introduce fundamental chemical concepts regarding molecular shape and atomic orbitals to students with little background in chemistry, such as one might find in a secondary school or first-year college chemistry course for nonmajors. Pilot studies employing the Shapes of Molecules and Atomic Orbitals activities demonstrate that students learn and retain key concepts.



KEYWORDS: High School/Introductory Chemistry, First-Year Undergraduate/General, Laboratory Instruction, Physical Chemistry, Computer-Based Learning, Computational Chemistry, Molecular Modeling, Quantum Chemistry, Theoretical Chemistry

Gambar 1 Publikasi mengenai aplikasi kimia komputasi pada pembelajaran

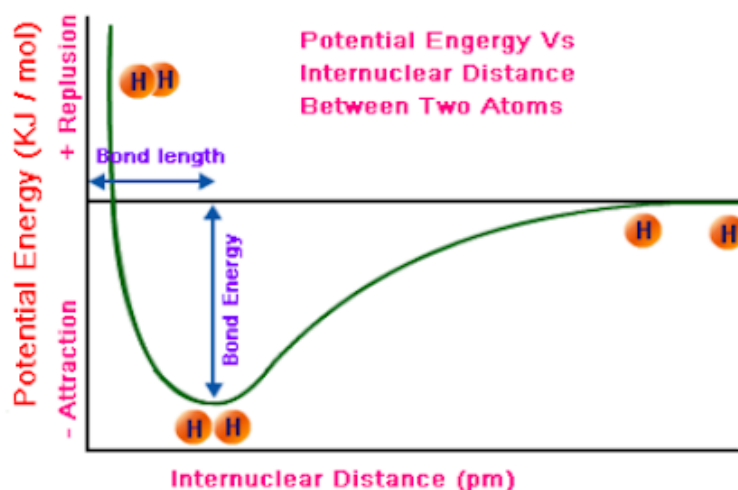
B. Struktur dan Energetika Molekul

Struktur molekul atau geometri molekul merupakan bentuk susunan/struktur tiga dimensi dari atom-atom yang menyusun suatu molekul. Pemahaman terhadap struktur molekul sangat penting karena dapat membantu dalam menentukan kepolaran, reaktivitas, fasa zat, warna, sifat magnet, serta aktivitas biologi. Untuk dapat menentukan struktur molekul, konsep struktur Lewis terlebih dahulu harus dikuasai. Meskipun teori Lewis tidak menentukan bentuk molekul, teori ini merupakan langkah pertama dalam memprediksi geometri molekul, karenan membantu dalam menentukan jumlah pasangan elektron ikatan dan pasangan elektron bebas. Setelah itu, geometri molekul ditentukan dengan menggunakan teori VSEPR (*valence-shell electron-pair repulsion*).

Teori VSEPR menyatakan bahwa pasangan elektron kulit valensi saling tolak-menolak satu sama lainnya, baik pasangan elektron tersebut berupa elektron ikatan maupun elektron bebas. Oleh karena itu, pasangan elektron akan tersebar sejauh mungkin satu dengan lainnya untuk meminimalkan gaya tolakan. VSEPR tidak hanya fokus pada pasangan elektron, namun juga gugus elektron secara keseluruhan. Sebuah gugus elektron dapat berupa satu pasang elektron, satu pasangan elektron bebas, sebuah elektron tunggal (tak berpasangan), suatu ikatan rangkap dua atau ikatan rangkap tiga pada atom pusat.

Geometri molekul ditentukan oleh posisi inti atom dan elektron. Elektron-elektron dan inti atom akan berada pada posisi yang meminimumkan gaya tolak dan memaksimalkan gaya tarik. Oleh karena itu, struktur molekul merefleksikan keadaan ekuilibrium di mana molekul memiliki energi serendah mungkin dalam sistem (energi

minimum). Contoh yang paling sederhana ada pada molekul H_2 yang akan memilih panjang ikatan optimum tertentu dalam molekulnya, karena pada panjang ikatan optimum tersebut, molekul berada pada energi paling rendah (Gambar 2). Oleh karena itu, struktur molekul erat kaitannya dengan energetika. Penentuan struktur molekul paling stabil serta parameter-parameter strukturnya (panjang ikatan, sudut ikatan, dll) dapat dilakukan melalui optimasi geometri menggunakan kimia komputasi.



Gambar 2 Energi vs jarak pemisahan pada molekul H_2

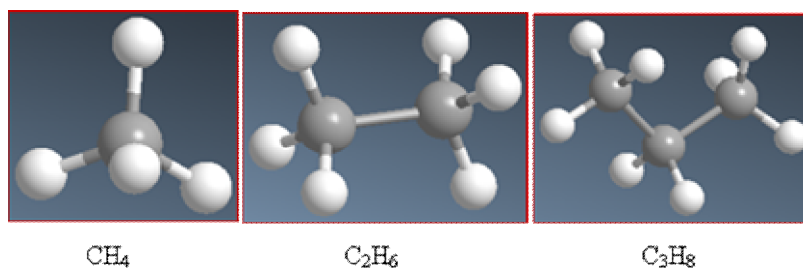
C. Modul Praktikum

Pada modul ini akan dipelajari bagaimana menggambarkan molekul dengan benar.

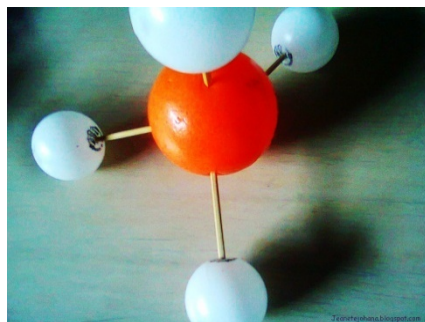
Ada beberapa cara untuk merepresentasikan molekul, antara lain:

1. Representasi Fisik
2. Visualisasi
3. Matematik

Gambaran molekul secara fisik biasanya digambarkan dengan menggunakan model molekul *molymod* seperti contoh berikut :



Contoh yang lain adalah model bola pingpong seperti contoh di bawah ini :



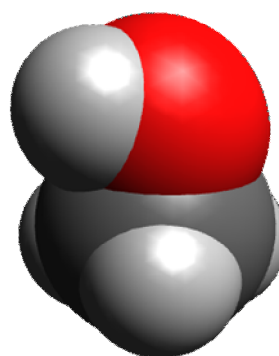
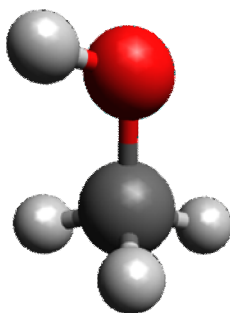
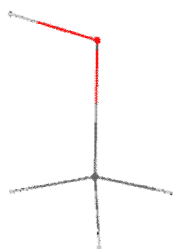
CH₄

Secara visual, terdapat beberapa model dalam penggambaran molekul antara lain:

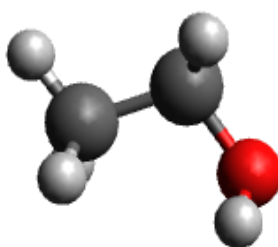
Model *wireframe*

Model *ball & stick*

Model *space filling*



Secara matematik, molekul digambarkan melalui koordinat kartesian atom-atom penyusunnya. Contohnya untuk molekul etanol (C₂H₅OH) :



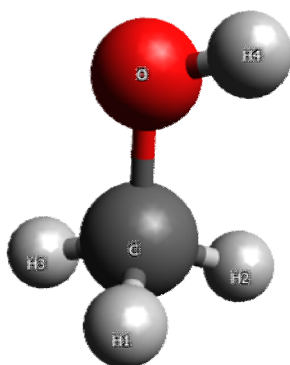
Koordinat atom-atom pada metanol antara lain:

C	-2.08227	1.41320	0.03241
C	-0.63920	1.87294	0.04614
H	-2.76164	2.25674	0.18335
H	-2.26017	0.67233	0.81880
H	-2.32362	0.93042	-0.92027
O	0.22471	0.76614	-0.16722
H	-0.38439	2.33789	1.00332
H	-0.46221	2.60229	-0.74965
H	0.06961	0.13042	0.55212

Praktikum I

Pemodelan Struktur Molekul

Langkah-langkah pembuatan struktur 3D molekul (misal: CH_3OH) dalam modul ini menggunakan bantuan perangkat lunak Avogadro versi 1.2.0. Perangkat lunak ini bersifat gratis, *open source*, dan dapat beroperasi pada komputer/laptop dengan berbagai sistem operasi (Windows, Linux, and Mac OS X). Informasi mengenai perangkat lunak Avogadro dapat dilihat pada laman avogadro.cc.

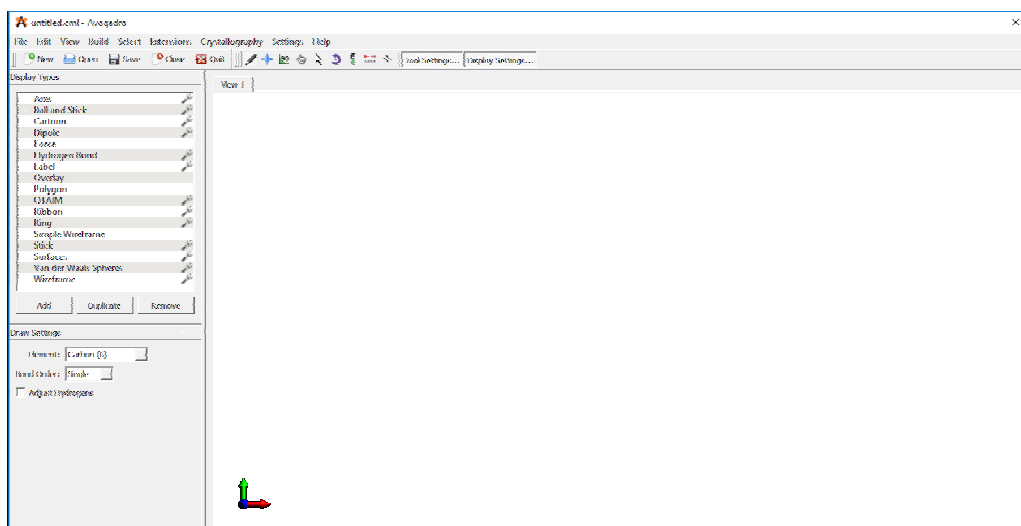


Struktur 3D molekul CH_3OH

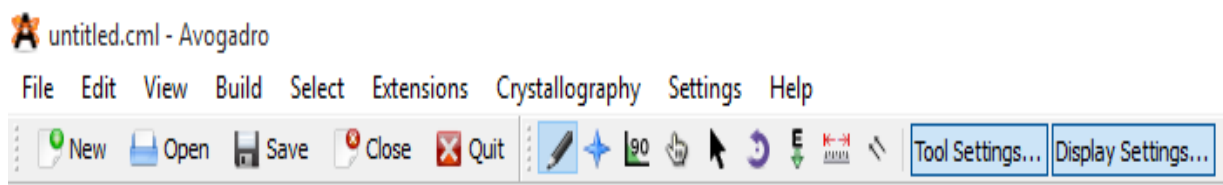
Langkah kerja

1. Buka software Avogadro

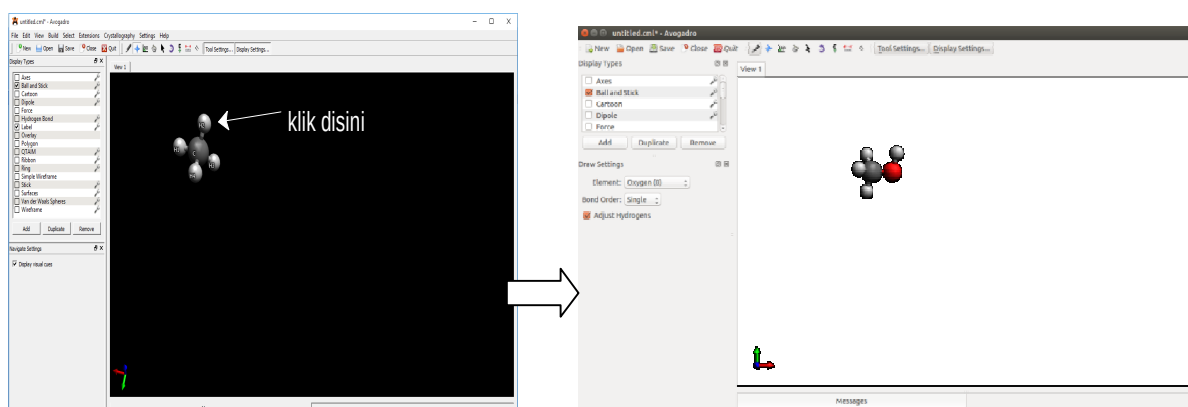
Double klik icon software avogadro  sehingga muncul tampilan layar berikut:



Gambar di bawah ini adalah tools bar Avogadro:



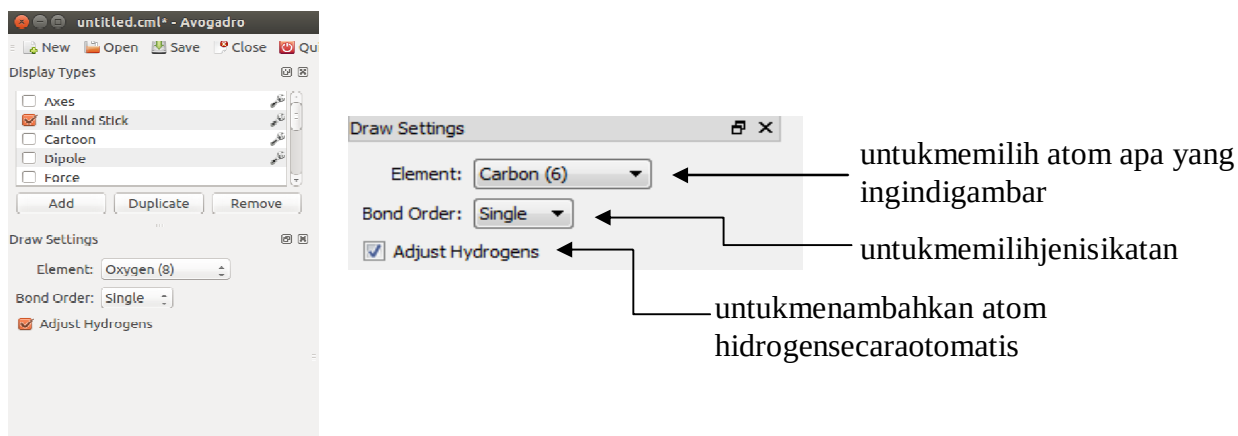
2. Pada *tools bar* pilih icon  kemudian klik (kiri) pada layar Avogadro, maka akan dihasilkan molekul metana. Lakukan pengaturan pada pengaturan gambar (*draw setting*) untuk *Element*, yang bertujuan mengubah atom *Carbon* menjadi *Oxygen*, klik arah panah ke bawah disebelah kotak dialog *Element*. Selanjutnya, klik pada salah satu atom hidrogen metana sehingga dihasilkan molekul metanol (CH_3OH). Sementara itu, untuk membuat struktur dengan rantai atom C yang lebih panjang, maka lakukan penambahan atom C sesuai dengan model struktur yang dibuat melalui cara yang sama.



keterangan:

 = atom karbon  = atom hidrogen  = atom oksigen

Icon  digunakan untuk menggambar molekul, ketika icon tersebut di klik akan tampil pengaturan gambar (*draw setting*) di samping kiri layar Avogadro seperti gambar berikut:



Untuk memutar molekul, klik icon  dan putar molekul tersebut pada *menu bar*.

3. Lakukan Optimasi geometri molekul dengan menekan **Ctrl+Alt+O**.

Tugas

Buat model struktur 3D dari molekul berikut dengan bantuan Avogadro versi 1.2.0 :

- a. H_2O
- b. C_6H_6
- c. $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{NH}_2$
- d. $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$
- e. $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$
- f. $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{OH})_4$

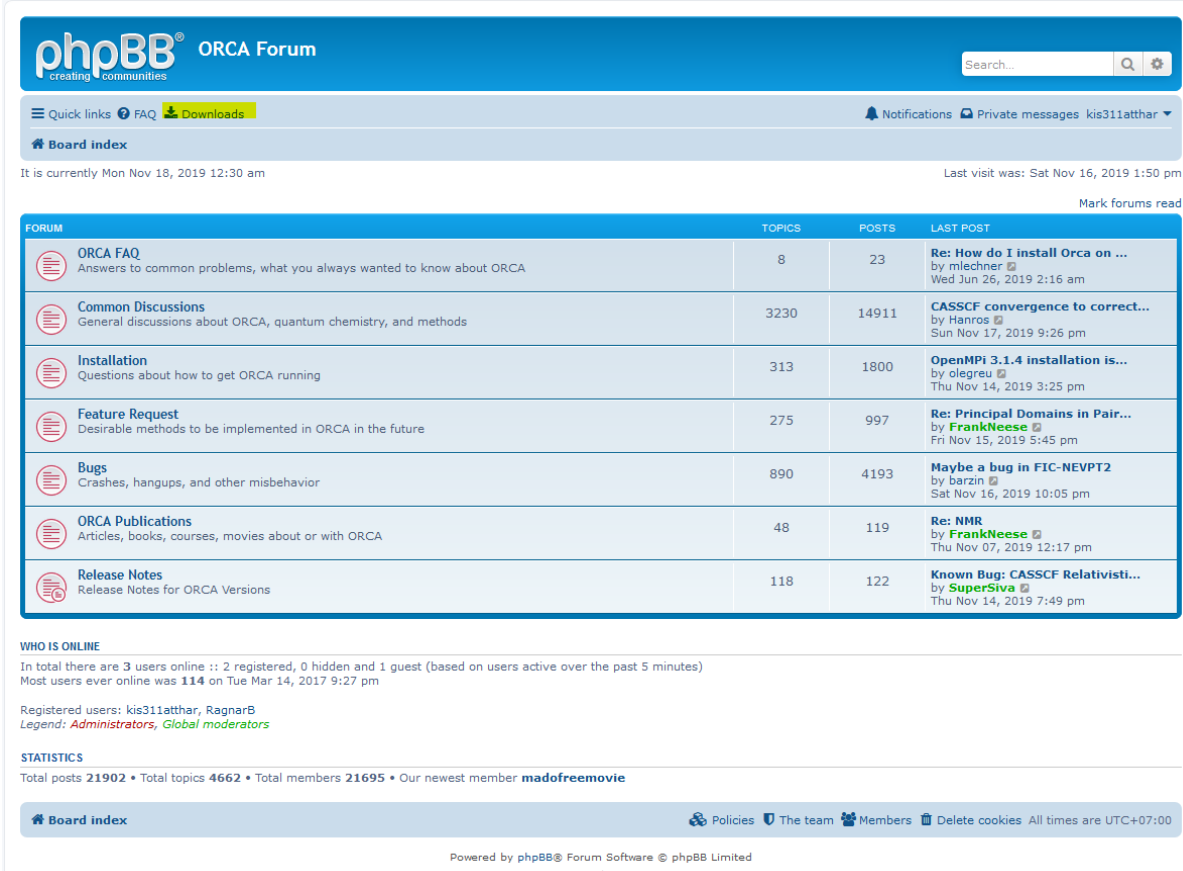
Praktikum II

Instalasi dan Penyiapan *Input File* ORCA

Instalasi ORCA versi 4.2.1 di Sistem Operasi Windows

ORCA adalah perangkat lunak ab initio, DFT, dan semiempirik yang dikembangkan oleh Frank Neese et al. ORCA memiliki beberapa kelebihan dibandingkan perangkat lunak lainnya yang memiliki fungsi sama seperti ORCA, salah satunya adalah penulisan input file nya yang “user friendly”, mirip seperti penulisan input file pada perangkat lunak berbayar Gaussian. ORCA dapat diinstall di Sistem Operasi Windows, Linux, dan MacOS. Berikut adalah petunjuk instalasi ORCA versi 4.2.1 di system operasi Windows (Sistem Operasi Windows yang dipakai pada contoh berikut adalah Windows 8.1, akan tetapi dapat diaplikasikan untuk Sistem Operasi Windows lainnya).

1. Download file ORCA pada alamat berikut :
<https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>
2. Login dengan username dan password yang sudah didaftarkan. Jika belum memiliki username dan password, lakukan registrasi di website tersebut dengan meng-klik **Register now!**
3. Setelah login berhasil, maka anda akan masuk pada halaman berikut :



The screenshot displays the phpBB ORCA Forum interface. At the top, there's a blue header with the phpBB logo and 'ORCA Forum' text. Below the header, a navigation bar contains links for Quick links, FAQ, Downloads, Notifications, Private messages, and a user profile for kis311atthar. The main content area features a forum index table with columns for Forum, Topics, Posts, and Last Post. The forums listed include ORCA FAQ, Common Discussions, Installation, Feature Request, Bugs, ORCA Publications, and Release Notes. Below the forum index, there's a 'Who is Online' section showing 3 users online (2 registered, 0 hidden, 1 guest) and a 'Statistics' section showing 21902 total posts, 4662 total topics, and 21695 total members. The footer includes a 'Board index' link, a 'Policies' link, and a note about the forum being powered by phpBB Forum Software.

FORUM	TOPICS	POSTS	LAST POST
ORCA FAQ Answers to common problems, what you always wanted to know about ORCA	8	23	Re: How do I install Orca on ... by mlechner Wed Jun 26, 2019 2:16 am
Common Discussions General discussions about ORCA, quantum chemistry, and methods	3230	14911	CASSCF convergence to correct... by Hanros Sun Nov 17, 2019 9:26 pm
Installation Questions about how to get ORCA running	313	1800	OpenMPI 3.1.4 installation is... by olegreu Thu Nov 14, 2019 3:25 pm
Feature Request Desirable methods to be implemented in ORCA in the future	275	997	Re: Principal Domains in Pair... by FrankNeese Fri Nov 15, 2019 5:45 pm
Bugs Crashes, hangups, and other misbehavior	890	4193	Maybe a bug in FIC-NEVPT2 by barzin Sat Nov 16, 2019 10:05 pm
ORCA Publications Articles, books, courses, movies about or with ORCA	48	119	Re: NMR by FrankNeese Thu Nov 07, 2019 12:17 pm
Release Notes Release Notes for ORCA Versions	118	122	Known Bug: CASSCF Relativisti... by SuperSiva Thu Nov 14, 2019 7:49 pm

WHO IS ONLINE
In total there are 3 users online :: 2 registered, 0 hidden and 1 guest (based on users active over the past 5 minutes)
Most users ever online was 114 on Tue Mar 14, 2017 9:27 pm
Registered users: kis311atthar, RagnarB
Legend: Administrators, Global moderators

STATISTICS
Total posts 21902 • Total topics 4662 • Total members 21695 • Our newest member madofreemovie

Board index Policies The team Members Delete cookies All times are UTC+07:00

Powered by phpBB® Forum Software © phpBB Limited
Privacy | Terms

4. Klik **Downloads**. Selanjutnya anda akan masuk ke halaman berikut :

ORCA Forum

[Quick links](#)
[FAQ](#)
[Downloads](#)

[Notifications](#)
[Private messages](#)
kis311atthar

[Board index](#) < [Downloads - Categories](#)

Downloads - Categories

Search download

CATEGORY / DESCRIPTION	FILE(S)	LATEST DOWNLOAD
ORCA 4.x End User License Agreement (EULA)	1	ORCA 4.x software EULA bugchucker Fri Feb 08, 2019 7:47 pm
ORCA 4.2.1	13	ORCA 4.2.1, Windows, 64bit, .zip Archive bugchucker Fri Nov 08, 2019 3:51 pm
ORCA 4.2.0	13	ORCA 4.2.0, Windows, 64bit, .zip Archive bugchucker Fri Aug 09, 2019 6:37 pm
ORCA 4.1.2	11	ORCA 4.1.2, Linux, x86-64, shared-version, .tarzst Archive (OpenMPI 2.1.5) bugchucker Fri May 03, 2019 10:05 pm
ORCA 4.1.1	15	ORCA 4.1.1, Windows, 64bit, Installer Version bugchucker Fri Feb 15, 2019 4:36 pm
ORCA 4.1.0	14	ORCA 4.1.0, Linux, x86-64, shared-version, .tarzst Archive (OpenMPI 2.1.5) bugchucker Sun Dec 16, 2018 11:54 pm
ORCA Manuals	5	ORCA 4.2.1 Manual bugchucker Wed Oct 30, 2019 4:20 pm
ORCA Jump-Start Guide	1	ORCA Jump-Start Guide bugchucker Wed Jan 23, 2019 4:09 pm
CASSCF Tutorial	1	CASSCF Tutorial bugchucker Mon Aug 12, 2019 3:18 pm
Avogadro (ORCA enhanced version)	1	Avogadro, Windows Version bugchucker Tue Apr 02, 2019 6:36 pm

Goto category: Category

[Overall list](#)
[Download configuration](#)

[Legend](#)
[Ministats](#)

Download Extension © by Hotschi, Demolition Fabi, OXPUS • Download Extension English language © by OXPUS

5. Pilih ORCA 4.2.1,maka anda akan masuk ke halaman berikut :

ORCA Forum

[Quick links](#)
[FAQ](#)
[Downloads](#)

[Notifications](#)
[Private messages](#)
kis311atthar

[Board index](#) < [Downloads - Categories](#) < **ORCA 4.2.1**

ORCA 4.2.1

Search download

INFO • NAME DESCRIPTION	SIZE	CURRENT CLICKS CLICKS TOTAL
ORCA 4.2.1, Windows, 64bit, Installer Version Windows 64-bit serial & parallel binaries Easy installation via installer, no admin rights necessary Linked against Microsoft-MPI v10.0.12498.5	1.78 GiB	301 • 301
ORCA 4.2.1, Windows, 64bit, .zip Archive Linked against Microsoft MPI 10.0.12498.5 orca_4_2_1_win64_msmapi10.zip	2.7 GiB	133 • 133
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, .tar.xz Archive Static serial binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 3.1.4 orca_4_2_1_linux_x86-64_openmpi314.tar.xz	3.35 GiB	611 • 1026
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, .tar.zst Archive Static serial binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 3.1.4 orca_4_2_1_linux_x86-64_openmpi314.tar.zst	3.09 GiB	36 • 66
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, shared-version, .tar.xz Archive Dynamically linked binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 3.1.4 orca_4_2_1_linux_x86-64_shared_openmpi314.tar.xz	379.92 MiB	112 • 187
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, shared-version, .tar.zst Archive Dynamically linked binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 3.1.4 orca_4_2_1_linux_x86-64_shared_openmpi314.tar.zst	275.32 MiB	42 • 64
ORCA 4.2.1, MacOS X, .tar.zst Archive Binaries linked against OpenMPI-3.1.4 orca_4_2_1_macosx_openmpi314.tar.zst	946.37 MiB	20 • 30
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, .tar.xz Archive (OpenMPI 2.1.6) Static serial binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 2.1.6 orca_4_2_1_linux_x86-64_openmpi216.tar.xz	3.35 GiB	43 • 103
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, .tar.zst Archive (OpenMPI 2.1.6) Static serial binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 2.1.6 orca_4_2_1_linux_x86-64_openmpi216.tar.zst	3.09 GiB	6 • 11
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, shared-version, .tar.xz Archive (OpenMPI 2.1.6) Dynamically linked binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 2.1.6 orca_4_2_1_linux_x86-64_shared_openmpi216.tar.xz	379.99 MiB	16 • 39
ORCA 4.2.1, Linux, x86-64, shared-version, .tar.zst Archive (OpenMPI 2.1.6) Dynamically linked binaries & parallel binaries linked against OpenMPI 2.1.6 orca_4_2_1_linux_x86-64_shared_openmpi216.tar.zst	275.34 MiB	5 • 26
ORCA 4.2.1, MacOS X, Installer Version Installer version, serial & parallel binaries,	3.93 GiB	50 • 171

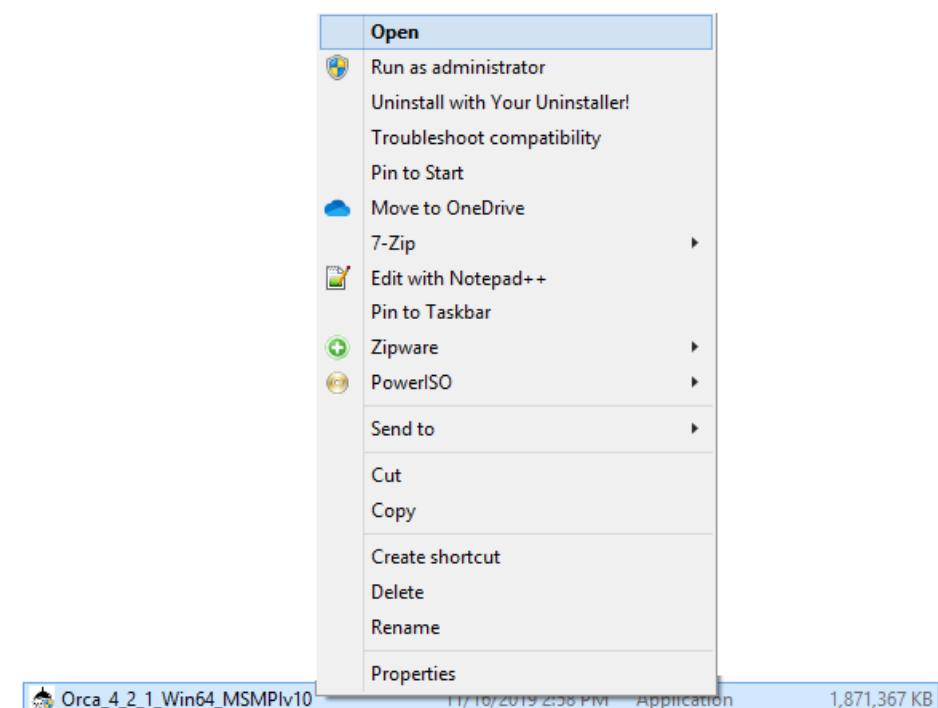
6. Pilih **ORCA 4.2.1, Windows, 64bit, Installer Version**, selanjutnya anda akan masuk ke halaman berikut :

The screenshot shows the phpBB ORCA Forum interface. At the top, there's a blue header with the phpBB logo and 'ORCA Forum'. Below it, a navigation bar includes links like 'Quick links', 'FAQ', 'Downloads', 'Notifications', 'Private messages', and a user profile 'kis311atthar'. The main content area is titled 'ORCA 4.2.1, Windows, 64bit, Installer Version' with a 'Search download' button. A 'Details' tab is active, showing file information: 'Orca_4_2_1_Win64_MSMPV10.exe', 'Last file modification: Fri Nov 08, 2019 3:50 pm', 'Size: 1.78 GiB', and 'Current Clicks / Clicks total: 301 / 301'. A large green 'Download' button is prominently displayed. At the bottom, there's a 'Goto category' dropdown and a 'Go' button, along with links for 'Overall list' and 'Download configuration'.

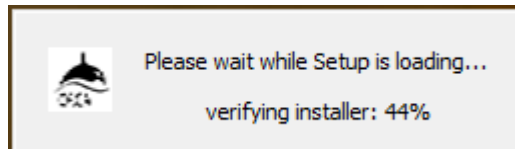
7. Klik tombol **Download**, maka ORCA akan otomatis terdownload ke computer anda.
8. Setelah selesai mendownload, anda akan mendapatkan file berikut :

 Orca_4_2_1_Win64_MSMPV10 11/16/2019 2:58 PM Application 1,871,367 KB

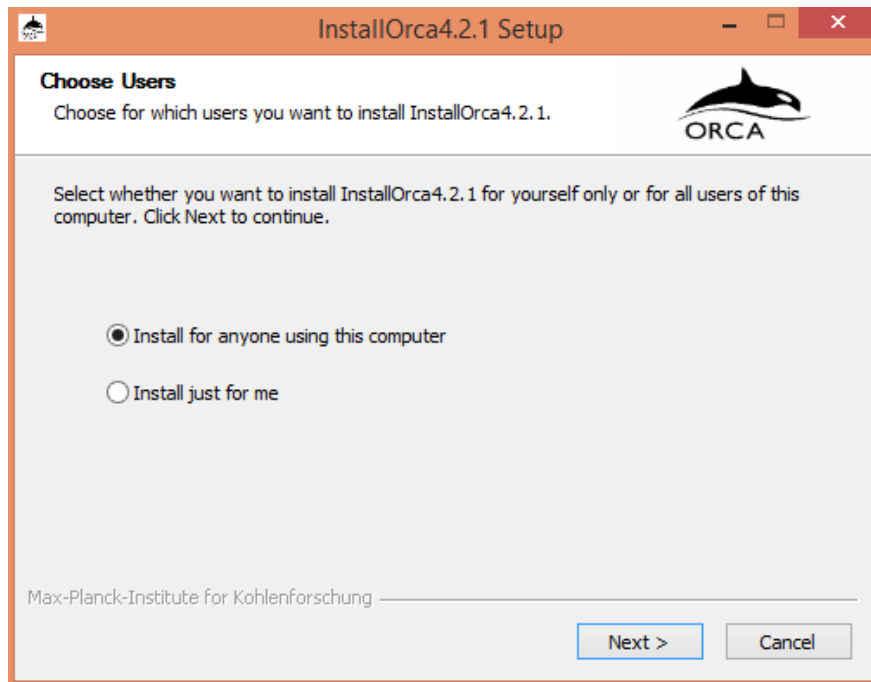
9. Selanjutnya klik kanan file tersebut dengan mouse dan kemudian klik **Open** :



10. ORCA akan mulai melakukan proses instalasi :

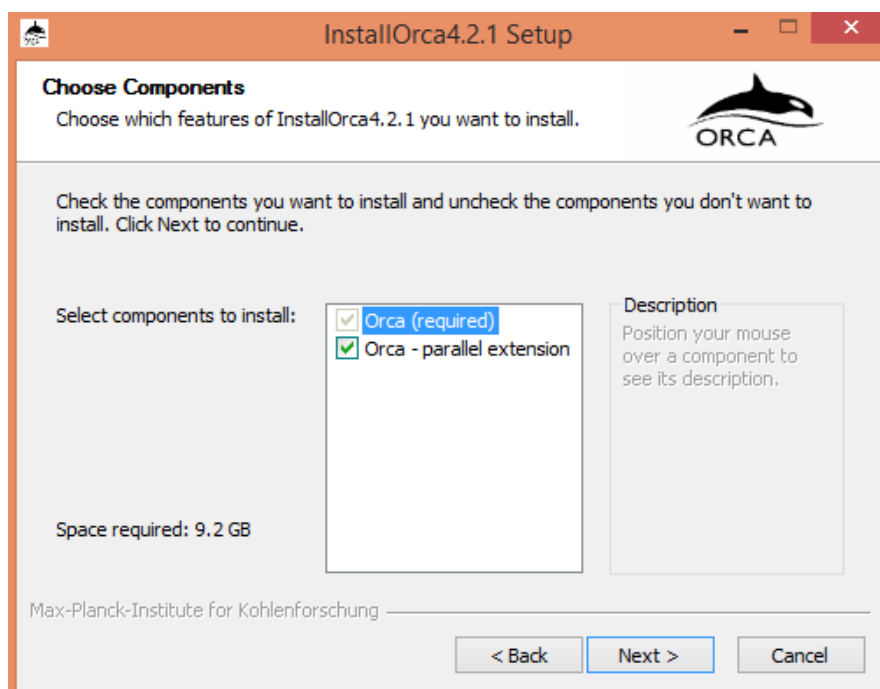


11. Selanjutnya akan muncul tampilan sebagai berikut pada saat proses instalasi sedang berlangsung :

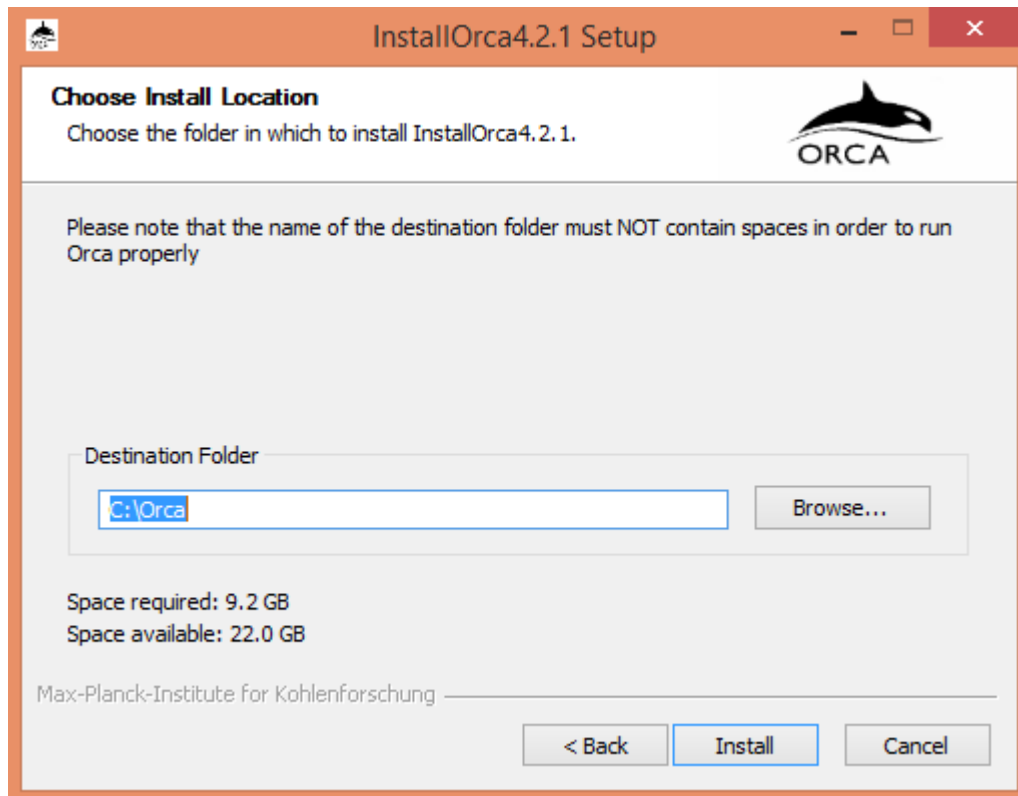


Pilih Install for anyone using this computer dan klik tombol **Next>**

12. Setelah mengklik tombol **Next >**, selanjutnya akan muncul tampilan sebagai berikut :

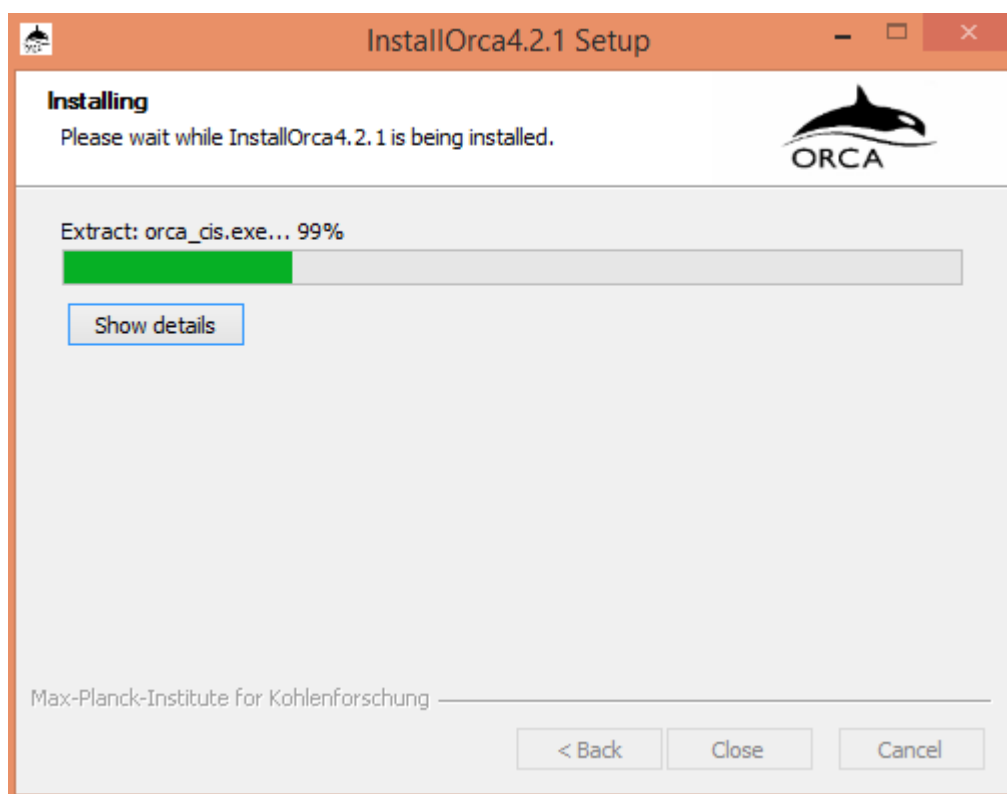


13. Klik **Next >**, maka akan muncul tampilan sebagai berikut :



14. Pilih Destination Folder **C:\Orca**, selanjutnya klik **Install**

15. Tunggu proses Instalasi selesai kemudian klik **Close**. Proses instalasi biasanya membutuhkan waktu sekitar 15-20 menit



Praktikum III

Submit Perhitungan dan Komputasi ORCA

Submit perhitungan dan komputasi ORCA versi 4.2.1 dilakukan di computer pribadi. Setelah berhasil menginstall ORCA seperti yang telah dilakukan pada Praktikum II, maka pada drive C: akan terdapat folder Orca seperti yang diperlihatkan pada gambar berikut :

This PC > Local Disk (C:)				
Name	Date modified	Type	Size	
Orca	11/18/2019 10:48 ...	File folder		

Dan di dalam folder Orca terdapat file-file executable sebagaiberikut :

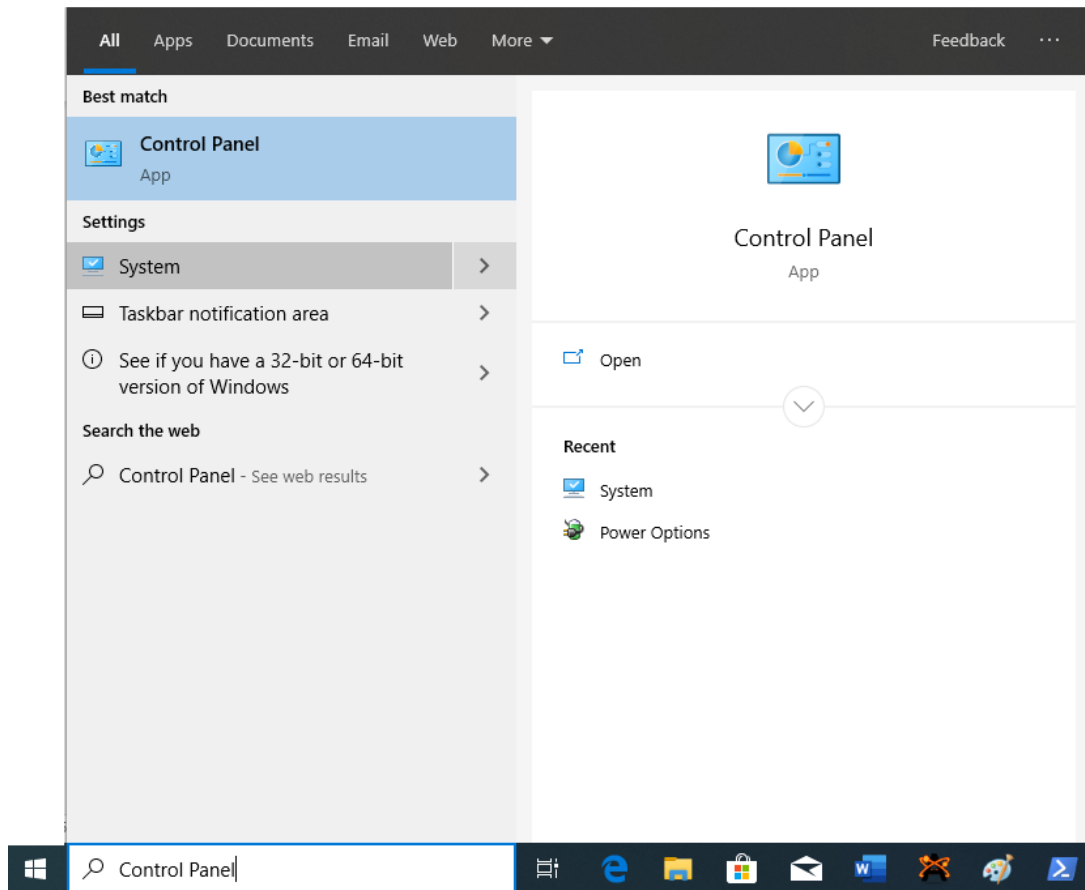
Name	Date modified	Type	Size
contrib	11/18/2019 10:39 PM	File folder	
autoci_fic_qsdcd3_rshift	11/6/2019 5:35 PM	Application	45,669 KB
autoci_fic_qsdcd3_sigma	11/6/2019 5:35 PM	Application	56,930 KB
autoci_ficmrci_ddci2_sigma	11/6/2019 5:35 PM	Application	52,053 KB
autoci_ficmrci_ddci3_sigma	11/6/2019 5:35 PM	Application	54,877 KB
autoci_ficmrci_ddci3_sigma_cosx	11/6/2019 5:35 PM	Application	54,877 KB
autoci_ficmrci_ddci4_density	11/6/2019 5:35 PM	Application	46,406 KB
autoci_ficmrci_ddci4_product	11/6/2019 5:35 PM	Application	45,741 KB
autoci_ficmrci_ddci4_spindensity	11/6/2019 5:35 PM	Application	48,621 KB
autoci_ficmrci_ddci4_transitiondensity	11/6/2019 5:35 PM	Application	46,174 KB
autoci_ficmrci_ddci4_transitionoverlap	11/6/2019 5:35 PM	Application	45,693 KB
autoci_ficmrci_pairEnergies	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,904 KB
autoci_ficmrci_sigma	11/6/2019 5:35 PM	Application	56,699 KB
autoci_iprocsd_denom_EPSILON	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,629 KB
autoci_iprocsd_denom_EPSILON_mpi	11/7/2019 4:36 PM	Application	45,701 KB
autoci_iprocsd_denom_somo	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,621 KB
autoci_iprocsd_denom_somo_mpi	11/7/2019 4:36 PM	Application	45,693 KB
autoci_iprocsd_density	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,596 KB
autoci_iprocsd_density_mpi	11/7/2019 4:36 PM	Application	45,668 KB
autoci_iprocsd_sigma_alpha	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,899 KB
autoci_iprocsd_sigma_alpha_doublet	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,776 KB
autoci_iprocsd_sigma_alpha_doublet_mpi	11/7/2019 4:36 PM	Application	45,848 KB
autoci_iprocsd_sigma_alpha_mpi	11/7/2019 4:36 PM	Application	45,971 KB
autoci_iprocsd_sigma_beta	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,789 KB
autoci_iprocsd_sigma_somo_mpi	11/7/2019 4:36 PM	Application	45,876 KB
autoci_rhf_cisd_density1	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,573 KB
autoci_rhf_cisd_der	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,612 KB
autoci_rhf_cisd_product	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,558 KB
autoci_rhf_denom_BO	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,588 KB
autoci_rhf_denom_DYALL	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,564 KB
autoci_rhf_denom_EPSILON	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,564 KB
autoci_rhf_norm_contra_cov	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,557 KB
autoci_rhf_poly1_sigma	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,669 KB
autoci_rhf_poly12_sigma	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,926 KB
autoci_rhf_poly14_sigma	11/6/2019 5:34 PM	Application	46,095 KB
autoci_rohf_cisd_product	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,575 KB
autoci_rohf_denom_BO	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,860 KB
autoci_rohf_denom_DYALL	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,659 KB
autoci_rohf_denom_EPSILON	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,613 KB
autoci_rohf_norm_contra_cov	11/6/2019 5:34 PM	Application	45,577 KB
autoci_rohf_poly1_sigma	11/6/2019 5:34 PM	Application	47,271 KB
autoci_rohf_poly12_sigma	11/6/2019 5:34 PM	Application	62,689 KB
autoci_uhf_denom_EPSILON	11/6/2019 5:35 PM	Application	45,572 KB
autoci_uhf_poly1_sigma	11/6/2019 5:35 PM	Application	45,872 KB
autoci_uhf_poly14_sigma	11/6/2019 5:35 PM	Application	47,131 KB
orca	11/7/2019 4:24 PM	Application	191,977 KB
orca_2aim	6/10/2015 9:40 PM	Icon	5 KB
orca_2aim	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,851 KB

orca_2mkl	11/6/2019 5:34 PM	Application	39,096 KB
orca_anoimt	11/6/2019 5:34 PM	Application	114,543 KB
orca_anoimt_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	114,623 KB
orca_asa	11/6/2019 5:34 PM	Application	39,185 KB
orca_autoci	11/6/2019 5:35 PM	Application	138,500 KB
orca_autoci_mpi	11/6/2019 6:48 PM	Application	138,603 KB
orca_blockf	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,762 KB
orca_casscf	11/6/2019 5:34 PM	Application	136,287 KB
orca_casscf_mpi	11/6/2019 5:44 PM	Application	136,389 KB
orca_cclib	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,792 KB
orca_chelpg	11/6/2019 5:34 PM	Application	115,329 KB
orca_ciprep	11/6/2019 5:34 PM	Application	123,785 KB
orca_cipsi	11/6/2019 5:34 PM	Application	125,559 KB
orca_cipsi_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	125,659 KB
orca_cis	11/6/2019 5:34 PM	Application	131,325 KB
orca_cis_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	131,410 KB
orca_cpccasscf	11/6/2019 5:34 PM	Application	125,158 KB
orca_cpccsf	11/6/2019 5:34 PM	Application	129,216 KB
orca_cpccsf_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	129,279 KB
orca_ecc	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,730 KB
orca_epmmr	11/6/2019 5:34 PM	Application	132,940 KB
orca_epmmr_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	133,027 KB
orca_esd	11/7/2019 4:24 PM	Application	127,014 KB
orca_euler	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,767 KB
orca_exportbasis	11/6/2019 5:34 PM	Application	176,619 KB
orca_fci	11/6/2019 5:34 PM	Application	117,894 KB
orca_fitpes	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,741 KB
orca_fragovl	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,835 KB
orca_gstep	11/6/2019 5:34 PM	Application	41,095 KB
orca_gtoint	11/6/2019 5:34 PM	Application	118,095 KB
orca_gtoint_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	118,174 KB
orca_loc	11/6/2019 5:34 PM	Application	114,815 KB
orca_mapspc	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,896 KB
orca_mcrpa	11/6/2019 5:34 PM	Application	124,612 KB
orca_mcrpa_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	124,702 KB
orca_md	11/7/2019 4:24 PM	Application	145,631 KB
orca_mdci	11/6/2019 5:34 PM	Application	157,741 KB
orca_mdci_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	157,813 KB
orca_mergefrag	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,716 KB
orca_mm	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,983 KB
orca_mm_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	39,011 KB
orca_mp2	11/6/2019 5:34 PM	Application	140,153 KB
orca_mp2_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	140,260 KB
orca_mrci	11/6/2019 5:34 PM	Application	128,345 KB
orca_mrci_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	128,464 KB
orca_ndoint	11/6/2019 5:34 PM	Application	131,836 KB
orca_numfreq	11/7/2019 6:40 PM	Application	126,205 KB
orca_pc	11/6/2019 5:34 PM	Application	114,118 KB
orca_pc_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	114,156 KB
orca_plot	11/6/2019 5:34 PM	Application	39,018 KB
orca_plot_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	39,055 KB
orca_pltlib	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,732 KB
orca_pnmr	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,938 KB
orca_pnmr_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	38,942 KB
orca_pop	11/6/2019 5:34 PM	Application	40,068 KB
orca_pop_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	40,096 KB
orca_rel	11/6/2019 5:34 PM	Application	115,901 KB
orca_rel_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	115,954 KB
orca_rocis	11/6/2019 5:34 PM	Application	131,907 KB
orca_rocis_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	132,008 KB
orca_scf	11/6/2019 5:34 PM	Application	141,877 KB
orca_scf_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	141,957 KB
orca_scfgrad	11/6/2019 5:34 PM	Application	134,168 KB
orca_scfgrad_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	134,260 KB
orca_scfhess	11/7/2019 4:24 PM	Application	133,081 KB
orca_scfhess_mpi	11/7/2019 4:37 PM	Application	134,467 KB
orca_soc	11/6/2019 5:34 PM	Application	116,237 KB
orca_soc_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	116,286 KB
orca_util	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,821 KB
orca_util_mpi	11/6/2019 5:39 PM	Application	38,859 KB
orca_yib	11/6/2019 5:34 PM	Application	38,856 KB
orca_vpot	11/6/2019 5:34 PM	Application	115,259 KB
orca4.2.1-eula	8/7/2019 6:38 PM	Foxit PhantomPD...	201 KB
otool_gcp	11/6/2019 5:35 PM	Application	1,064 KB
Third_Party_Licenses_ORCA_4.2.1	8/7/2019 6:37 PM	Foxit PhantomPD...	192 KB
uninstall	11/18/2019 10:39 PM	Application	57 KB

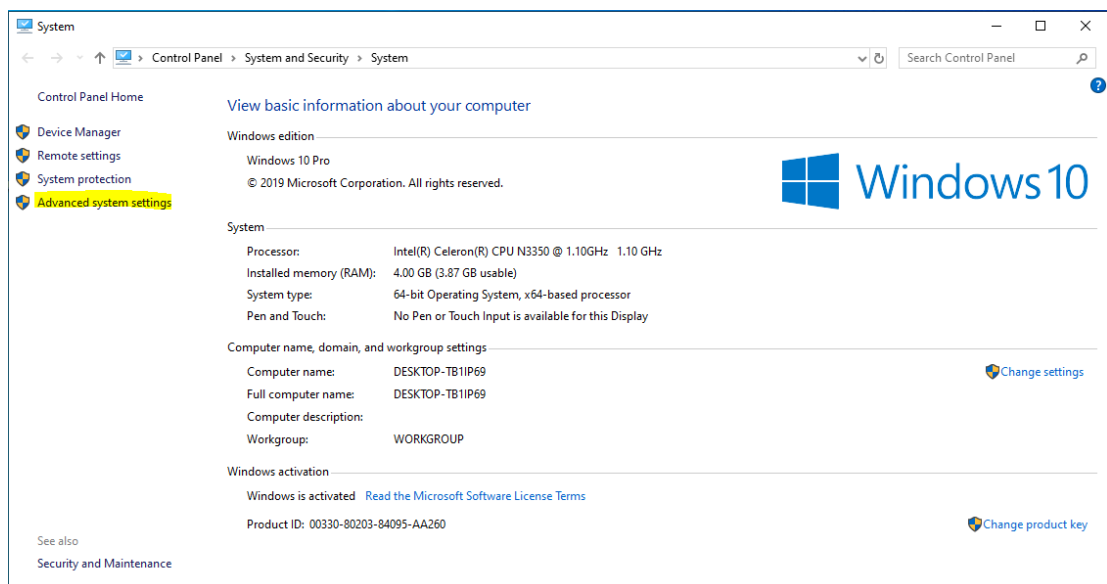
Setelah berhasil melakukan instalasi, tahap selanjutnya adalah melakukan setting environment file executable **orca** agar dapat dipanggil tanpa harus menuliskan alamat lengkap di mana file **orca** berada. Caranya adalah sebagai berikut :

1. Search dan klik **Control Panel**, maka secara otomatis pilihan **System** juga

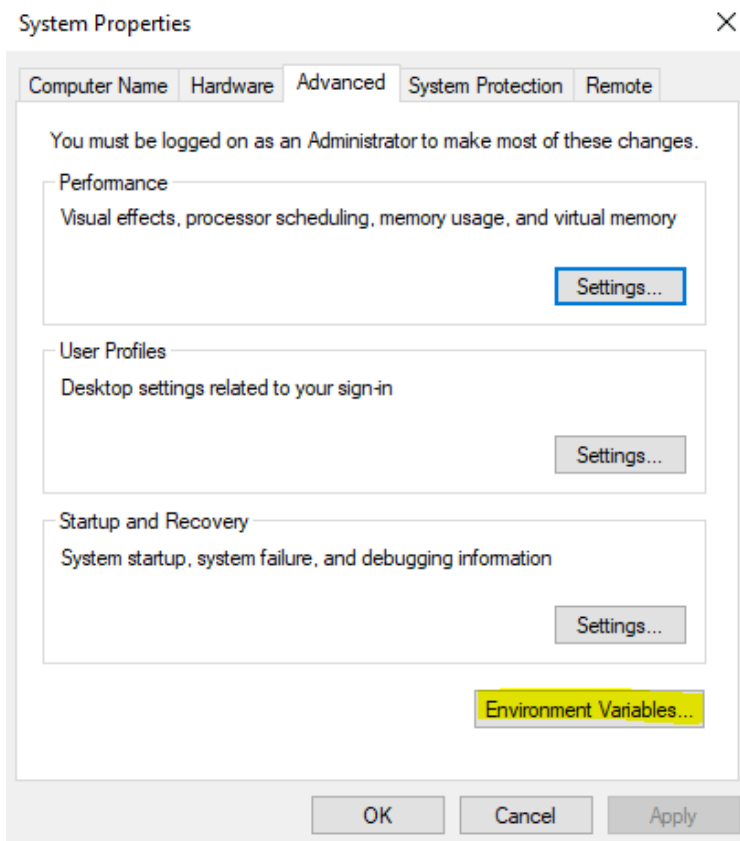
akan ditampilkan. Klik **System**



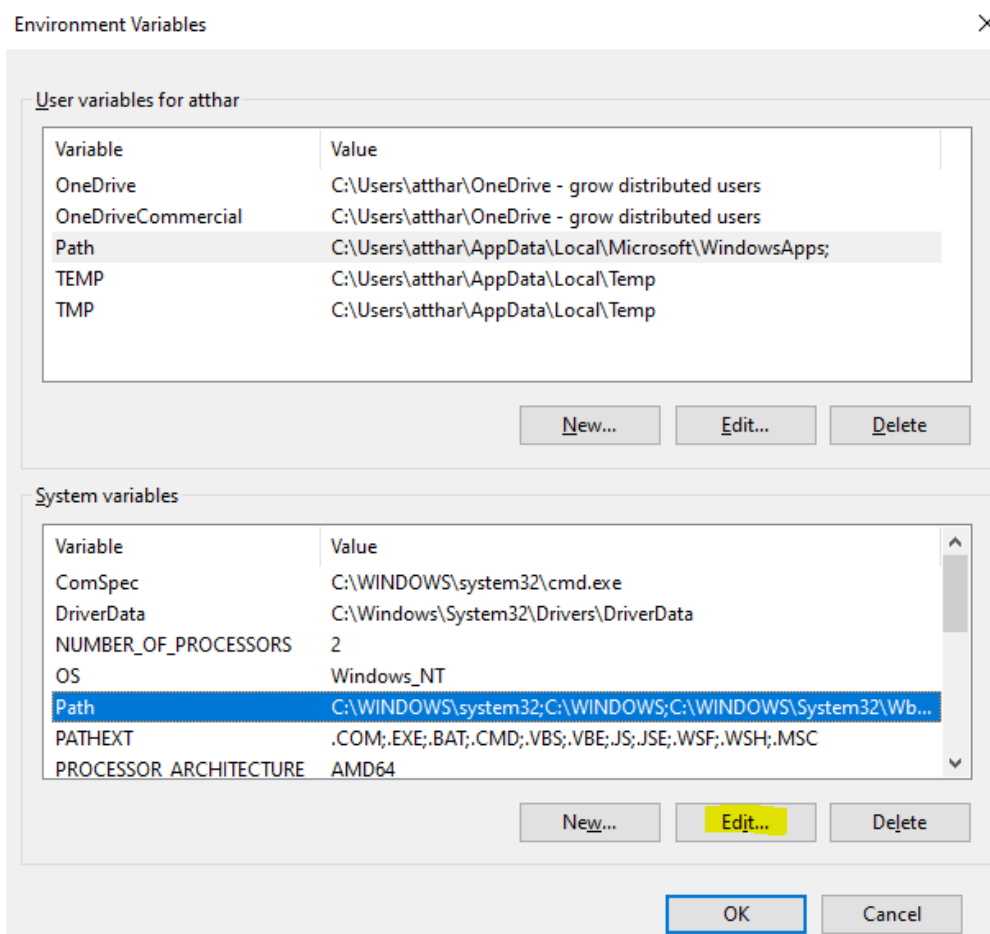
Maka akan muncul jendela sebagai berikut :



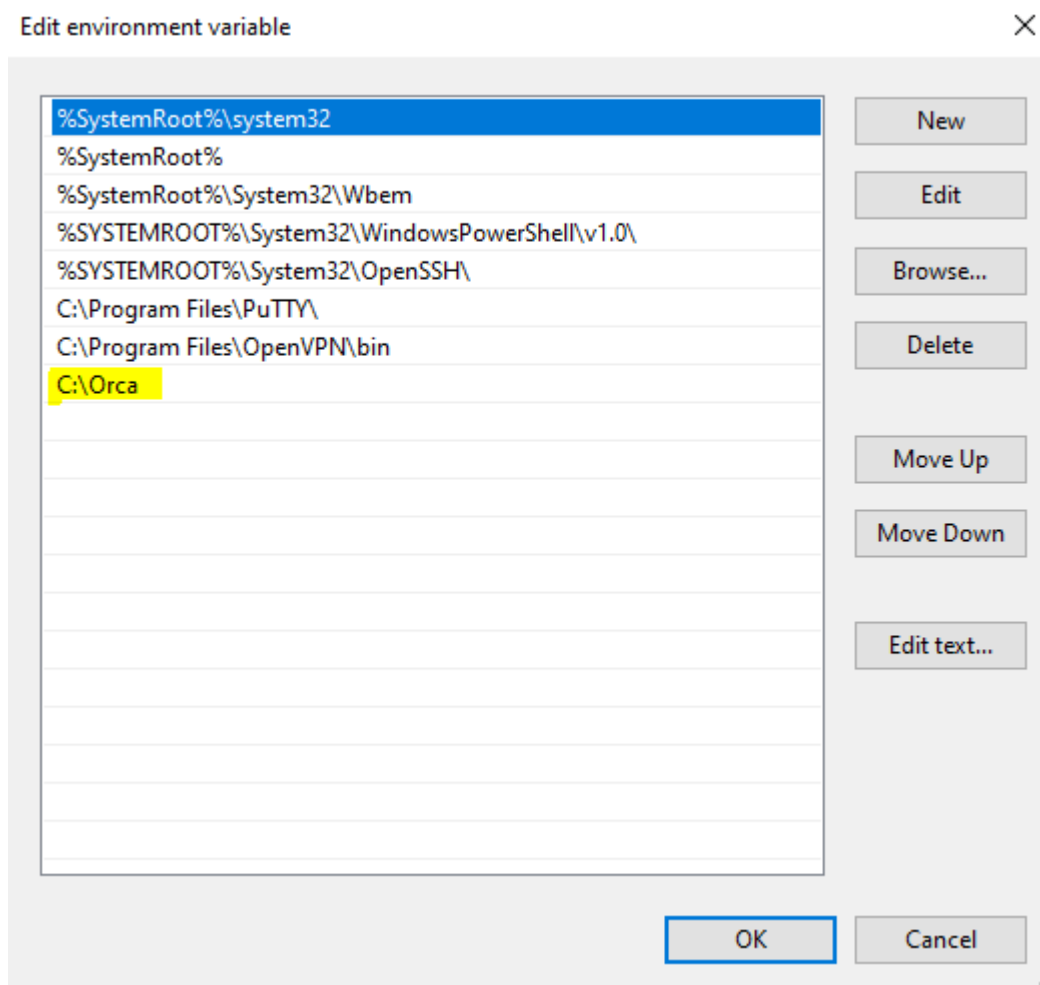
2. Klik kiri **Advanced system settings** (bagian yang diberi highlight), maka akan muncul jendela **System Properties** sebagai berikut :



3. Klik **Environment Variables**, maka akan muncul jendela berikut :



4. Klik kiri **Path** pada kotak System variables, kemudian klik kiri tombol **Edit...**, maka akan muncul tampilan berikut:

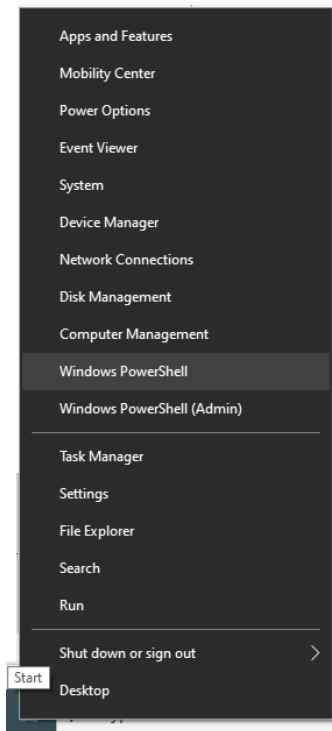


Pada jendela Edit environment variable, terlihat bahwa alamat file-file executable Orca (bagian yang diberi highlight kuning) sudah ditambahkan secara otomatis ke dalam environment sehingga kita tidak perlu menambahkan lagi. Namun, jika belum ada, maka dapat ditambahkan dengan meng-klik tombol **New**, kemudian mengetikkan alamat file-file executable Orca, yaitu **C:\Orca**

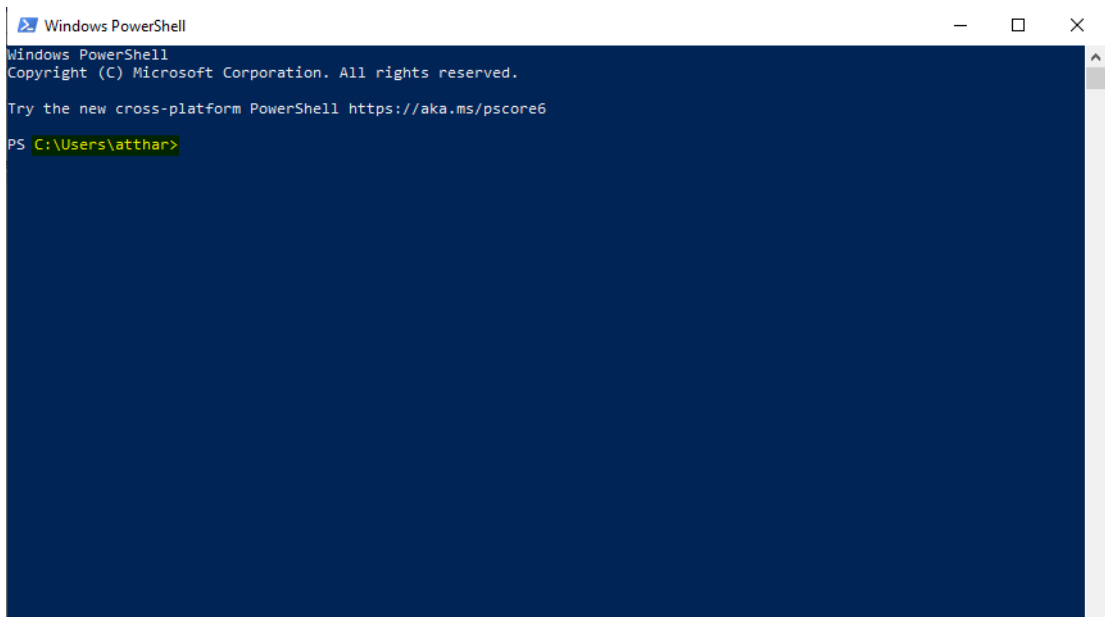
5. Orca sudah berhasil terinstall dan file-file executablenya telah ditambahkan ke dalam environment

Selanjutnya, kita akan membuat folder tempat perhitungan Orca dengan tahapan sebagai berikut :

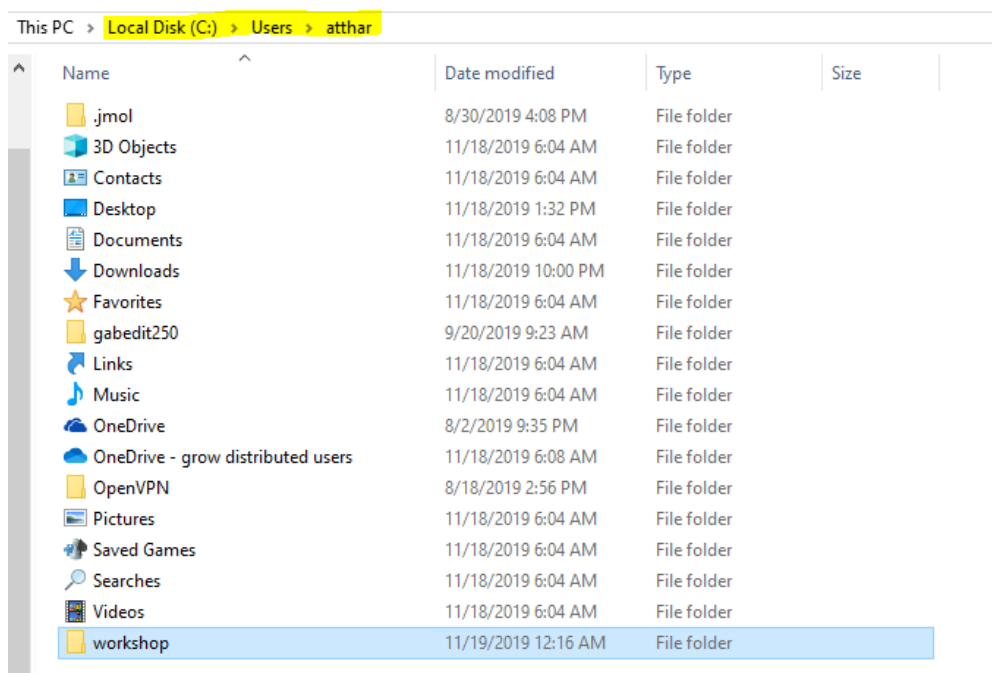
1. Buka *command prompt* dengan cara klik kanan logo Windows di sebelah pojok kiri bawah, kemudian pilih (klik kiri) Windows PowerShell



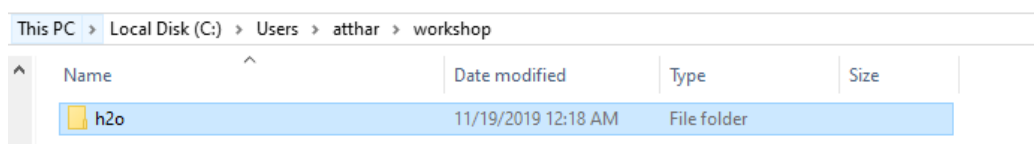
Maka akan muncul jendela *command prompt* (Windows PowerShell)



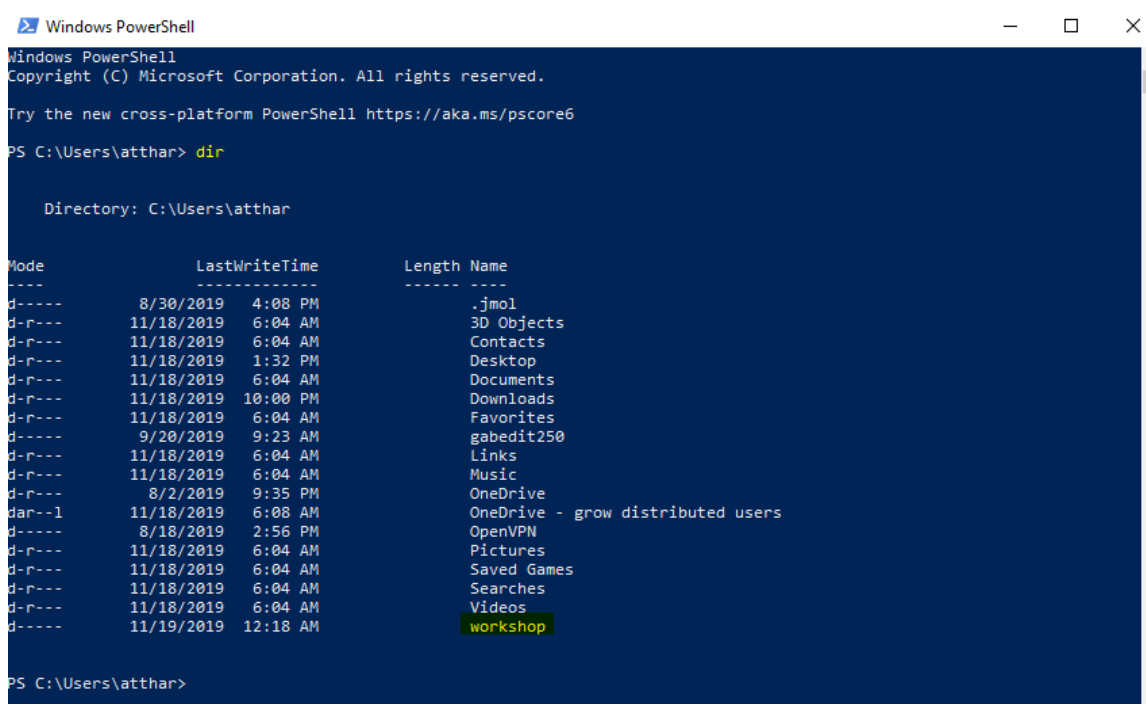
2. Perhatikan bagian yang diberi highlight (**C:\Users\atthar>**). Bagian yang diberi highlight menandakan bahwa “posisi” kita sedang berada di Drive C:, folder Users, dan folder atthar. “atthar” adalah nama user yang dibuat ketika melakukan instalasi Windows, sehingga untuk alamat **C:\Users\atthar** disesuaikan dengan alamat pada laptop masing-masing peserta.
3. Masuk ke dalam windows explorer dan menuju ke alamat **C:\Users\atthar>**, kemudian buat folder baru, misal folder dengan nama wokshop, seperti yang terlihat pada gambar berikut :



- Masuk ke dalam folder workshop kemudian buat folder baru lagi dengan nama molekul yang akan kita hitung menggunakan Orca, misal H₂O:



- Selanjutnya, kita kembali ke Windows PowerShell, dan ketikkan perintah **dir**. Perintah **dir** adalah perintah untuk melihat isi di dalam folder di mana kita berada (dalam hal ini, kita berada di folder **C:\Users\attthar**)



- Pada alamat **C:\Users\attthar**, terlihat folder workshop yang sebelumnya telah

kita buat. Selanjutnya kita masuk ke dalam folder **workshop** dan masuk ke dalam folder **h2o**. Caranya adalah dengan mengetikkan perintah **chdir workshop\h2o**

```
PS C:\Users\atthar> chdir workshop\h2o
PS C:\Users\atthar\workshop\h2o>
```

Setelah berhasil membuat folder tempat perhitungan Orca, langkah selanjutnya adalah membuat input file Orca dengan menggunakan bantuan perangkat lunak Notepad++. Secara garis besar, input file perhitungan Orca sangat sederhana dan *user friendly*. Bagian-bagian input file Orca adalah sebagai berikut :

! B3LYP 6-31G(D) OPT FREQ

*xyz 0 1

O -3.2462601774 -4.2354799670 -4.3540446738

H -2.2569338396 -4.2709687943 -4.3780728277

H -3.5356250570 -5.0196761547 -4.8849944994

*

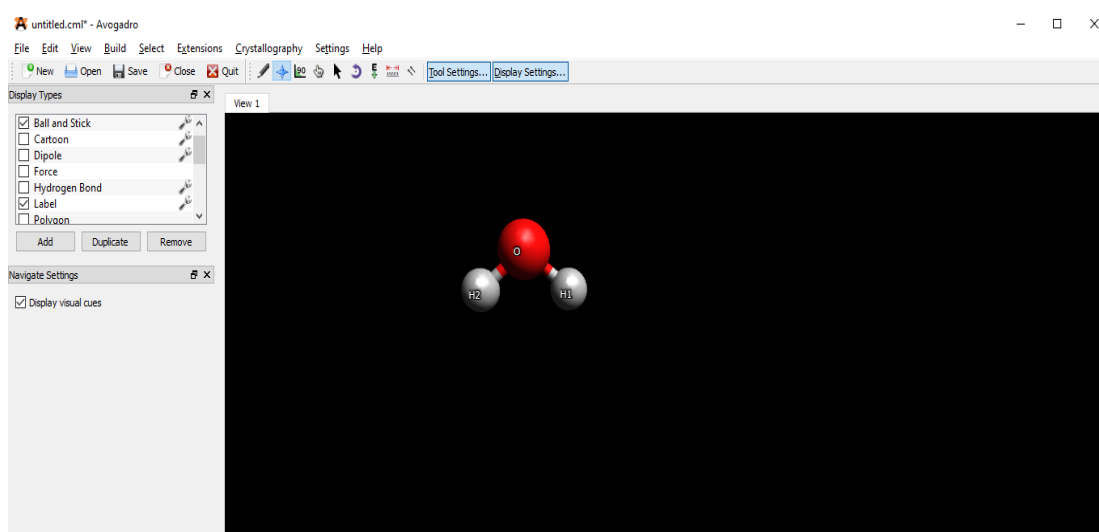
Keterangan input file tersebut adalah sebagai berikut :

- Baris pertama adalah baris perintah untuk menjalankan Orca. Baris pertama selalu dimulai dengan tanda seru !
- B3LYP adalah suatu level teori metode DFT (*Density Functional Theory*)
- 6-31G(D) adalah basis set
- OPT adalah perintah untuk mengoptimasi geometri molekul
- FREQ adalah perintah untuk melakukan perhitungan Frekuensi, yang mana hasil dari perhitungan frekuensi ini dapat digunakan untuk menghitung parameter termodinamika seperti ΔU , ΔH , ΔS , ΔG
- Setelah baris pertama (baris kedua) adalah baris kosong
- Setelah baris kosong, baris selanjutnya (baris ketiga) adalah baris yang berisi informasi mengenai tipe penulisan koordinat atom-atom dalam molekul, muatan dan multiplisitas
- Baris ketiga dimulai dengan * diikuti xyz[spasi]0[spasi]1
- Pada baris ketiga, xyz menandakan bahwa kita akan menggunakan koordinat cartesian dalam menuliskan posisi atom-atom dalam suatu molekul.

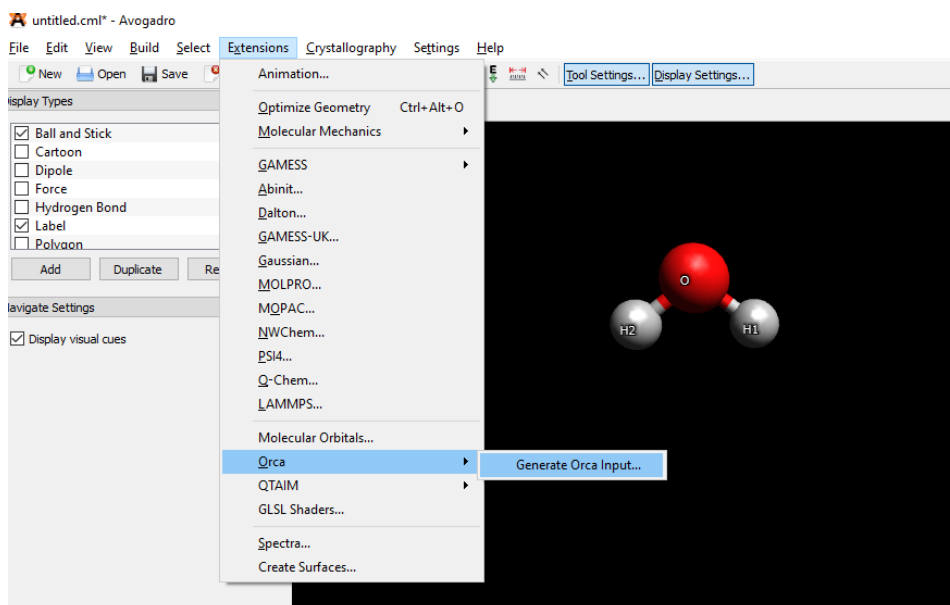
- Setelah xyz, adalah informasi tentang muatan total molekul. Pada contoh H₂O, H₂O adalah molekul netral, sehingga muatan total H₂O adalah **0**
- Setelah muatan molekul, selanjutnya adalah multiplisitas. Multiplisitas dihitung dengan persamaan: $2S + 1$, dimana S adalah total spin elektron. Misalkan jika semua elektron dalam suatu molekul adalah berpasangan, maka nilai $S = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 0$, sehingga nilai multiplisitas adalah **1**.
- Baris keempat dan seterusnya adalah koordinat atom-atom dalam molekul (yang dalam hal ini dinyatakan dalam koordinat kartesian).
- Baris terakhir diakhiri dengan tanda asterisk *

Berikut langkah-langkah pembuatan input file Orca

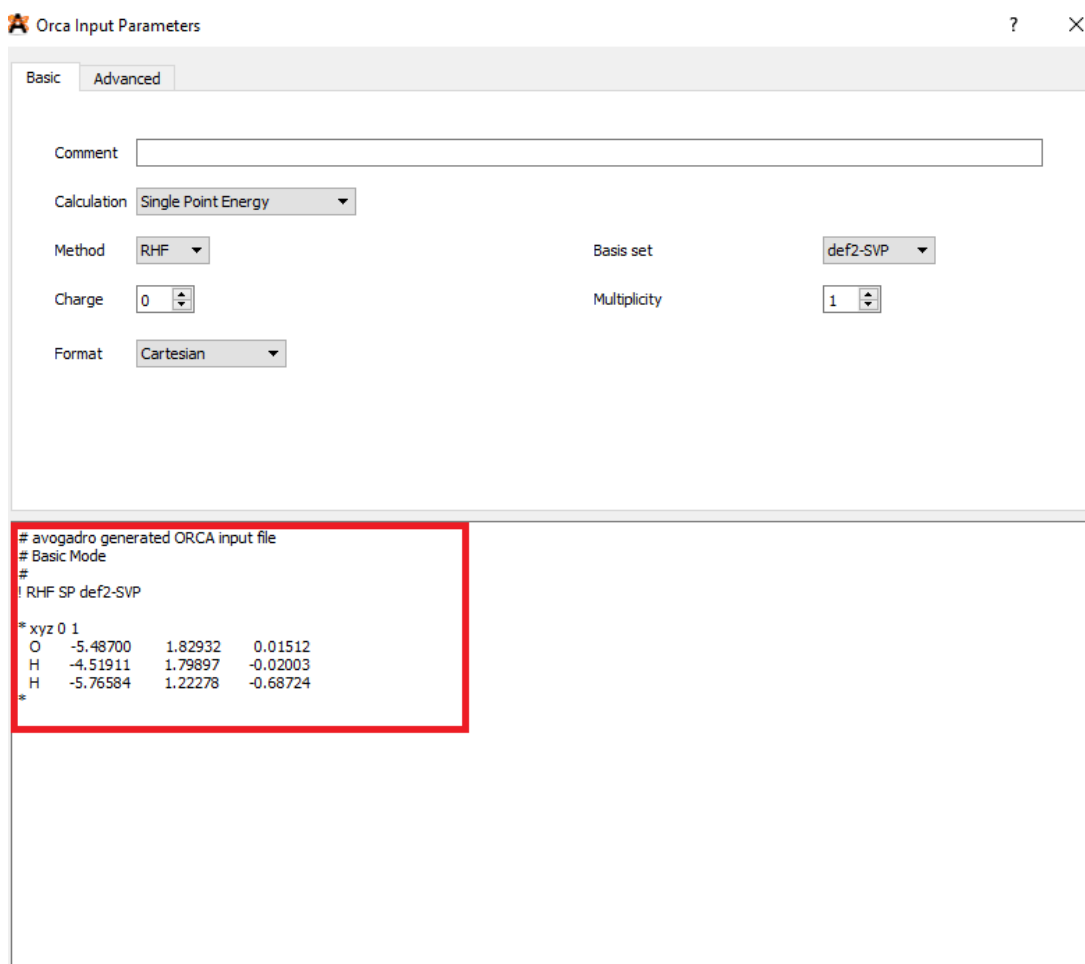
1. Install Notepad++. Notepad++ dapat di download pada link berikut : <https://notepad-plus-plus.org/downloads/>. Cara instalasi Notepad++ sama seperti cara instalasi perangkat lunak Windows lainnya.
2. Buka Avogadro dan buatlah molekul seperti pada praktikum sebelumnya. Pada contoh ini, kita ingin memodelkan molekul H₂O. Buatlah molekul H₂O di Avogadro, lakukan optimasi geometri dengan metode MM yang terdapat di Avogadro.



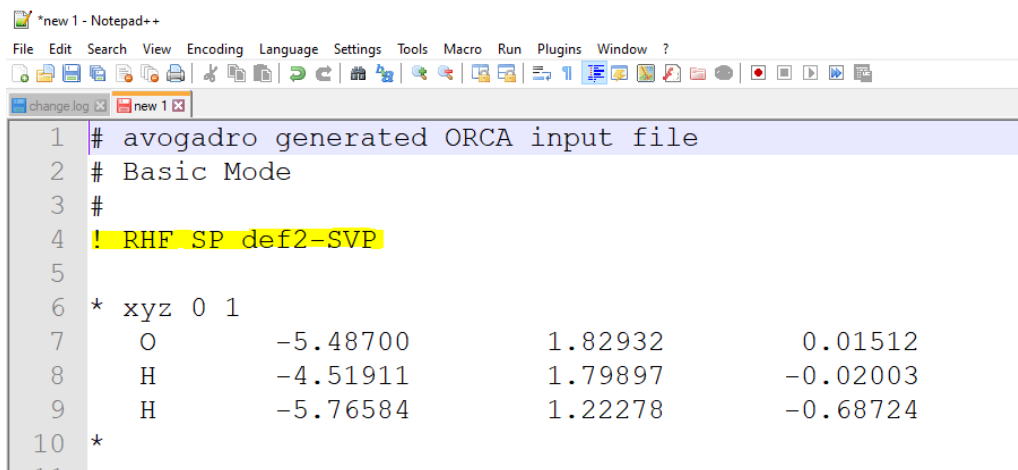
3. Kemudian klik **Extension → Orca → Generate Orca Input**



Maka akan muncul tampilan sebagai berikut :



4. Copy seluruh bagian yang terdapat di dalam kotak dengan garis tepi berwarna merah pada gambar di atas.
5. Buka Notepad++
6. *Paste*-kan semua bagian yang di-copy pada langkah 4 ke Notepad++



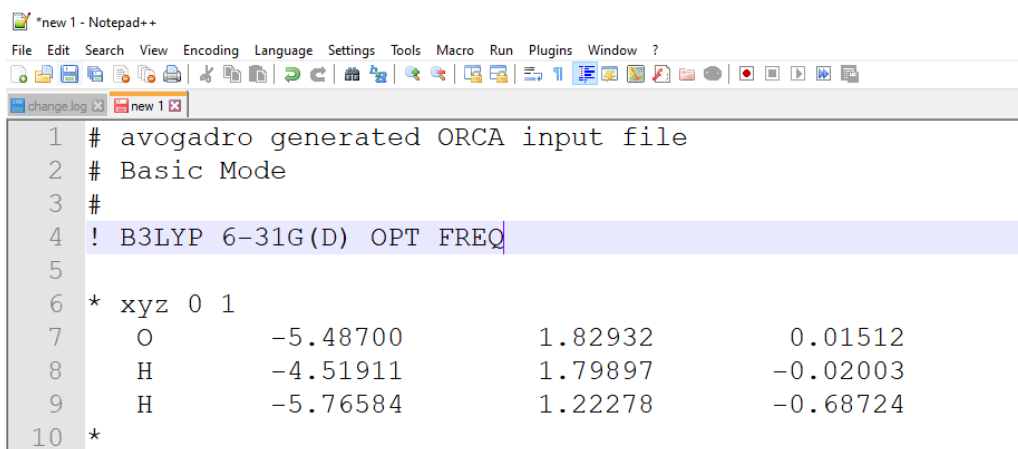
```

1 # avogadro generated ORCA input file
2 # Basic Mode
3 #
4 ! RHF SP def2-SVP
5
6 * xyz 0 1
7   O      -5.48700      1.82932      0.01512
8   H      -4.51911      1.79897     -0.02003
9   H      -5.76584      1.22278     -0.68724
10  *
11

```

7. Edit bagian yang diberi *highlight* berwarna kuning menjadi :

! B3LYP 6-31G(D) OPT FREQ



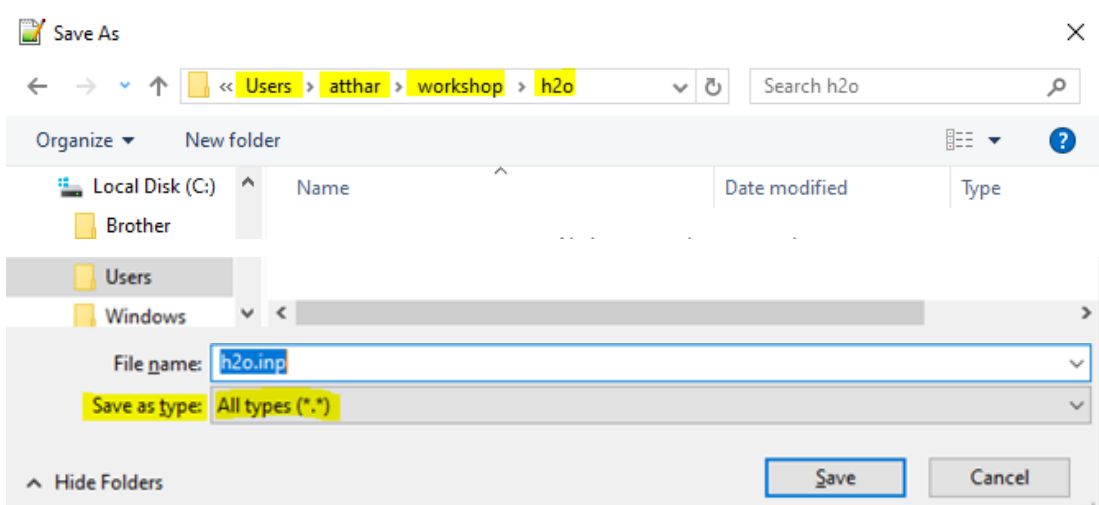
```

1 # avogadro generated ORCA input file
2 # Basic Mode
3 #
4 ! B3LYP 6-31G(D) OPT FREQ
5
6 * xyz 0 1
7   O      -5.48700      1.82932      0.01512
8   H      -4.51911      1.79897     -0.02003
9   H      -5.76584      1.22278     -0.68724
10  *
11

```

8. Simpan file input tersebut ke dalam folder **C:\Users\latthar\workshop\h2o** dengan meng-klik **File → Save as** dengan nama file, misalkan **h2o.inp**.

9. Pastikan Save as type: All types (*.*). Langkah 8 dan 9 diperlihatkan oleh gambar berikut. Perhatikan bagian yang diberi highlight berwarna kuning.



Lokasi : **C:\Users\latthar\workshop\h2o**

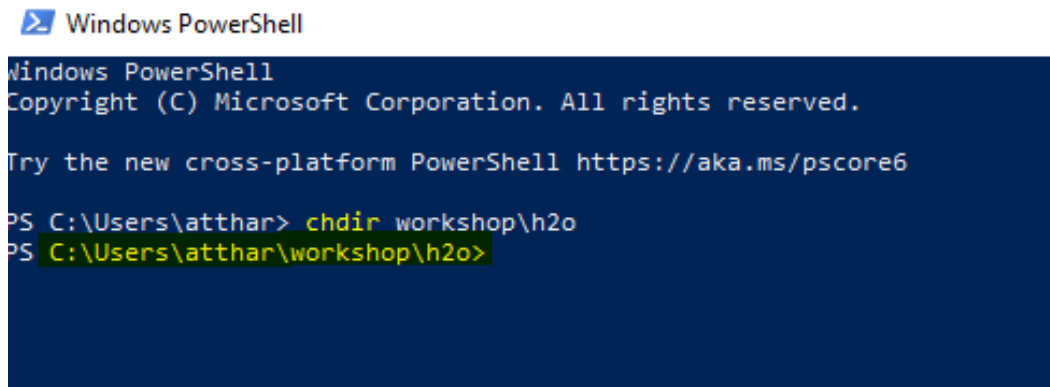
File name : h2o.inp

Save as type : All types (*.*)

10. Selanjutnya klik **Save**. File input Orca telah tersimpan dan siap untuk dijalankan dengan Orca.

Berikut adalah langkah-langkah untuk menjalankan File Input **h2o.inp** dengan perangkat lunak Orca :

1. Buka **Windows PowerShell** dan pastikan posisi sudah berada di **C:\Users\atthar\workshop\h2o** seperti yang telah dijelaskan pada tahap sebelumnya.

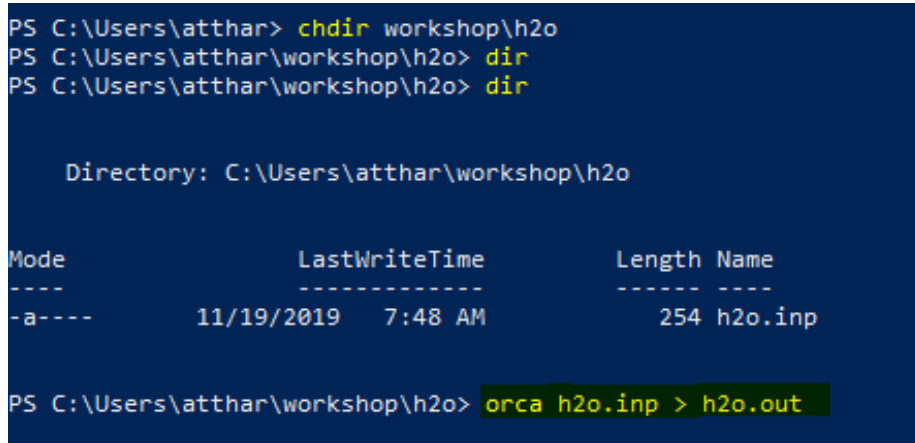


```
Windows PowerShell
Copyright (C) Microsoft Corporation. All rights reserved.

Try the new cross-platform PowerShell https://aka.ms/pscore6

PS C:\Users\atthar> chdir workshop\h2o
PS C:\Users\atthar\workshop\h2o>
```

2. Ketik **orca h2o.inp > h2o.out**, lalu tekan tombol **enter** di keyboard laptop anda



```
PS C:\Users\atthar> chdir workshop\h2o
PS C:\Users\atthar\workshop\h2o> dir
PS C:\Users\atthar\workshop\h2o> dir

Directory: C:\Users\atthar\workshop\h2o

Mode                LastWriteTime         Length Name
----                -
-a----           11/19/2019   7:48 AM             254 h2o.inp

PS C:\Users\atthar\workshop\h2o> orca h2o.inp > h2o.out
```

3. Jika tidak ada pesan error, anda berhasil menjalankan file input h2o.inp dengan perangkat lunak Orca. Cara untuk memastikan proses Orca berjalan atau tidak, ada dua cara yaitu : (1) cek folder **C:\Users\atthar\workshop\h2o**. Pada folder tersebut akan dihasilkan beberapa file yang berekstensi *.tmp; (2) mengecek Windows Task Manager dan mencari apakah terdapat proses yang bernama orca

This PC > Local Disk (C:) > Users > atthar > workshop > h2o

Name	Date modified	Type	Size
h2o.cold.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	3 KB
h2o.diis.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	20 KB
h2o.E.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	1 KB
h2o.engrad	11/19/2019 7:51 AM	ENGRAD File	1 KB
h2o.f0.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	2 KB
h2o.fsv.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	2 KB
h2o.gbw	11/19/2019 7:52 AM	GBW File	501 KB
h2o.ginp.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	1 KB
h2o.gpot0.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	103 KB
h2o.grho0.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	103 KB
h2o.grid.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	199 KB
h2o.gu.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	1 KB
h2o.H.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	2 KB
h2o.hess	11/19/2019 7:52 AM	HESS File	6 KB
h2o.inp	11/19/2019 7:48 AM	INP File	1 KB
h2o.int.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	2 KB
h2o.K.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	33 KB
h2o.opot0.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	103 KB
h2o.opt	11/19/2019 7:52 AM	OPT File	1 KB
h2o.orho0.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	103 KB
h2o.out	11/19/2019 7:52 AM	OUT File	0 KB
h2o.p0.tmp	11/19/2019 7:52 AM	TMP File	2 KB
h2o.prop	11/19/2019 7:52 AM	PROP File	1 KB

Gambar di atas memperlihatkan banyak dihasilkan file berekstensi *.tmp yang dihasilkan ketika proses Orca sedang berlangsung

Windows PowerShell (5)	34.0%	154.0 MB	0.2 MB/s	0 Mbps	0%
Console Window Host	0%	3.6 MB	0 MB/s	0 Mbps	0%
orca	0%	46.5 MB	0 MB/s	0 Mbps	0%
orca_scfl	34.0%	77.3 MB	0.2 MB/s	0 Mbps	0%
Windows Command Processor	0%	0.9 MB	0 MB/s	0 Mbps	0%
Windows PowerShell	0%	25.8 MB	0.1 MB/s	0 Mbps	0%

Proses Orca sedang berjalan pada Windows PowerShell

- Jika perhitungan anda telah selesai, cek lah apakah apakah terjadi **error** atau tidak. Cara mengeceknya adalah dengan membuka file **h2o.out** menggunakan Notepad++, kemudian menuju bagian akhir file. Jika perhitungan anda berhasil, maka akan dihasilkan tulisan ******ORCA TERMINATED NORMALLY****** pada akhir file seperti yang diperlihatkan oleh gambar berikut :

```

C:\Users\atthar\workshop\h2o\h2o.out - Notepad++
File Edit Search View Encoding Language Settings Tools Macro Run Plugins Window ?
change.log h2o.inp h2o.out
1465
1466 The Gibbs free energy is  $G = H - T \cdot S$ 
1467
1468 Total enthalpy ... -76.34499314 Eh
1469 Total entropy correction ... -0.02210074 Eh -13.87 kcal/mol
1470 -----
1471 Final Gibbs free energy ... -76.36709389 Eh
1472
1473 For completeness - the Gibbs free energy minus the electronic energy
1474 G-E(el) ... 0.00278567 Eh 1.75 kcal/mol
1475
1476
1477 Timings for individual modules:
1478
1479 Sum of individual times ... 30.949 sec (= 0.516 min)
1480 GTO integral calculation ... 1.420 sec (= 0.024 min) 4.6 %
1481 SCF iterations ... 14.376 sec (= 0.240 min) 46.5 %
1482 SCF Gradient evaluation ... 1.080 sec (= 0.018 min) 3.5 %
1483 Geometry relaxation ... 0.210 sec (= 0.003 min) 0.7 %
1484 Analytical frequency calculation... 13.863 sec (= 0.231 min) 44.8 %
1485 ****ORCA TERMINATED NORMALLY****
1486 TOTAL RUN TIME: 0 days 0 hours 0 minutes 31 seconds 952 msec
1487
length: 66,634 lines: 1,487 Ln: 1,485 Col: 62 Sel: 32 | 1 Windows (CR LF) UCS-2 LE BOM INS

```

Tugas II

Buatlah *input file* Orca untuk molekul di bawah ini melalui Notepad++, selanjutnya simpan file tersebut dalam format nama_file.inp dan jalankan file tersebut dengan perangkat lunak Orca di computer anda!

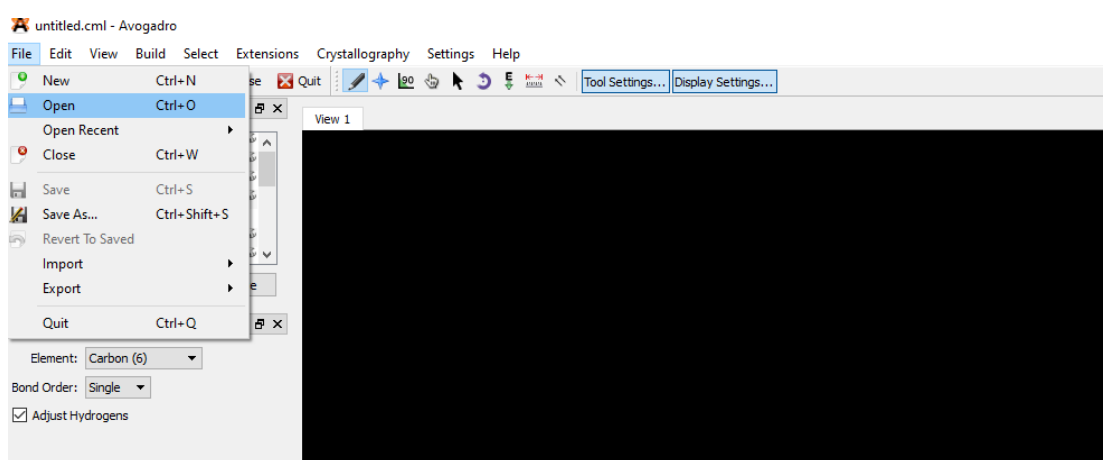
- | | |
|-----------------|-------------|
| a. $C_6H_5NO_2$ | e. NO_2 |
| b. C_6H_5OH | f. C_3H_6 |
| c. C_3H_7Cl | |
| d. HCl | |

Praktikum IV

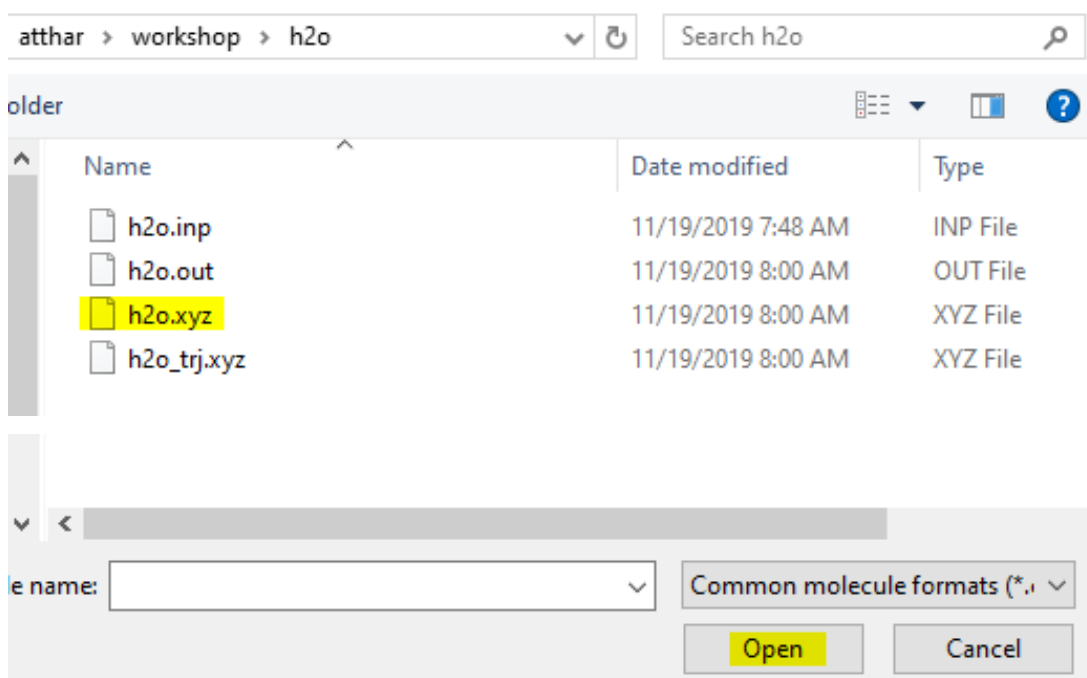
Penentuan Panjang Ikatan dan Sudut Ikatan

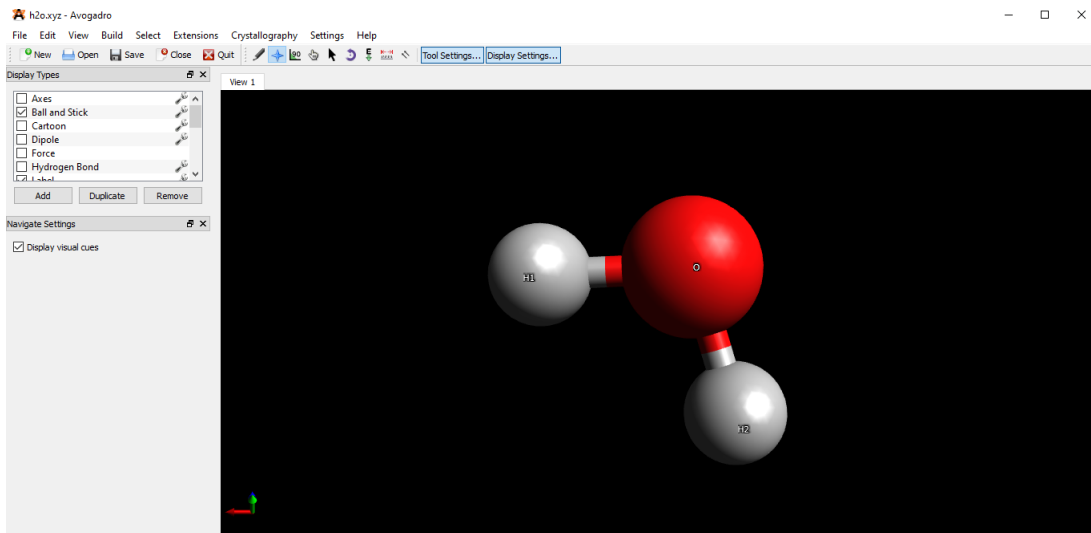
Setelah berhasil melakukan optimasi geometri pada molekul, kita dapat menentukan parameter struktur yang telah teroptimasi, seperti panjang ikatan dan sudut ikatan. Sebagai contoh, kita akan menghitung panjang ikatan O-H dan sudut ikatan H-O-H pada molekul H_2O yang telah kita optimasi. Langkah-langkahnya adalah sebagai berikut:

1. Buka perangkat lunak Avogadro
2. Klik **File**→**Open**



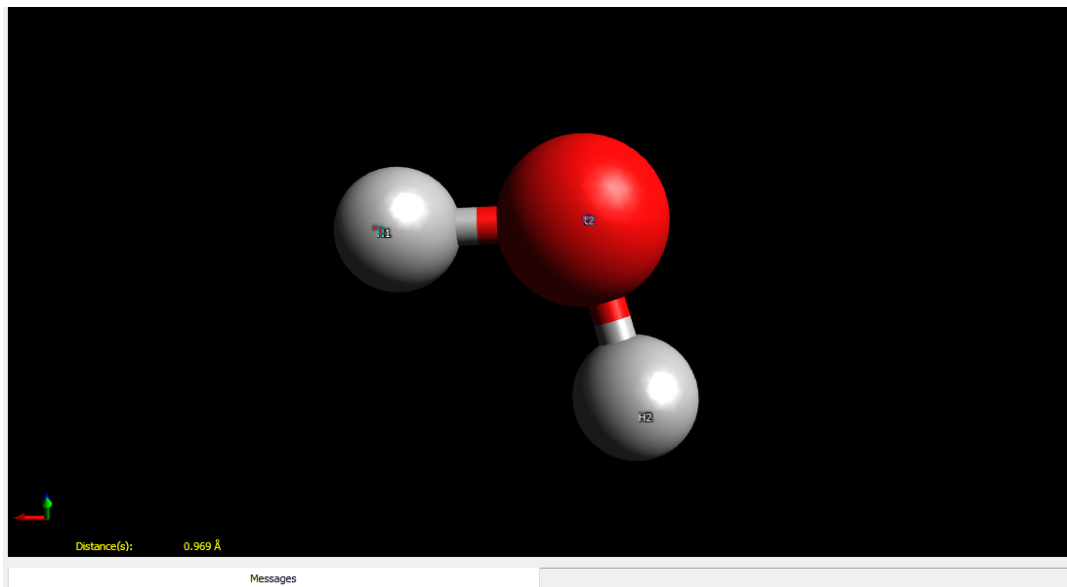
3. Masuk ke dalam folder **C:\Users\atthar\workshop\h2o**, kemudian pilih file **h2o.xyz** dan klik open





Molekul H₂O hasil optimasi

4. Selanjutnya, klik icon  di perangkat lunak Avogadro
5. Klik atom H1 dan O, akan diperoleh panjang ikatan O-H, yaitu **0,969 Å**



Pada bagian pojok kiri bawah tertulis

Distance(s): 0.969 Å

6. Kemudian klik atom H2 maka akan diperoleh sudut ikatan H-O-H, yaitu **103,9°**

Angle: 103.9°

Dari hasil eksperimen diperoleh bahwa panjang ikatan O-H pada H₂O **fasa gas** adalah **0,96Å**, sedangkan sudut ikatan H-O-H pada H₂O fasa gas adalah **104,5°**. Perbedaan antara hasil perhitungan komputasi dan eksperimen untuk panjang ikatan O-H dan sudut ikatan H-O-H secara berturut-turut adalah **0,94%** dan **0,57%**

Tugas III

Dengan mengikuti langkah-langkah pada Praktikum III dan IV, isilah tabel di bawah ini pada kolom komputasi dan % error!

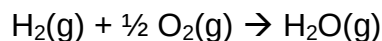
Molekul	Ikatan	Komputasi	Eksperimen (Å)	% eror
H ₂	H-H		0,741	
HF	H-F		0,917	
O ₃	O-O		1,272	
CO ₂	C-O		1,16	
C ₂ H ₄	C-C		1,334	
C ₂ H ₄	C-H		1,08	
CH ₄	C-H		1,086	

$$\% \text{ eror} = \frac{|\text{Nilai hasil eksperimen} - \text{Nilai hasil komputasi}|}{\text{Nilai hasil eksperimen}} \times 100\%$$

Praktikum V

Penentuan ΔH° Reaksi

Nilai parameter termodinamika ΔH° dari suatu reaksi kimia dapat diprediksi dengan bantuan komputasi menggunakan perangkat lunak Orca. Sebagai contoh, untuk reaksi berikut :

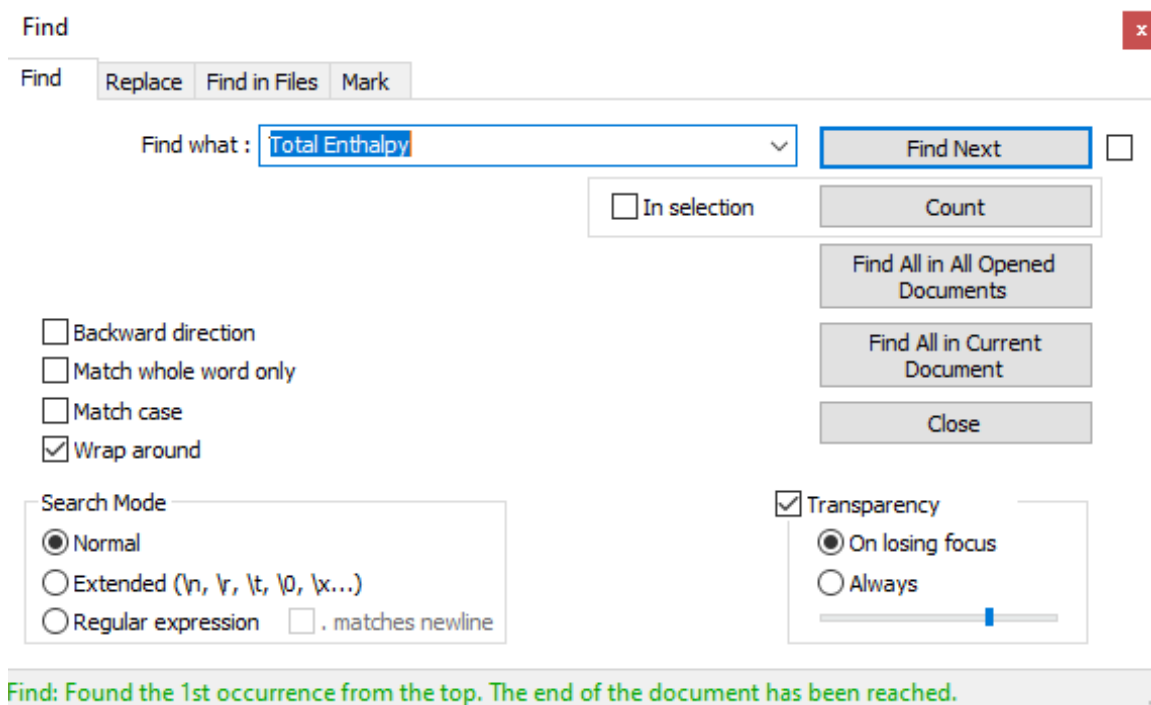


$$\Delta H^\circ_{\text{reaksi}} = \sum H^\circ_{\text{produk}} - \sum H^\circ_{\text{pereaksi}}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reaksi}} = (H^\circ_{\text{H}_2\text{O}}) - (H^\circ_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} H^\circ_{\text{O}_2})$$

Nilai H° untuk H_2O dapat diperoleh pada file output h2o.out yang telah kita hitung pada praktikum III. Langkah-langkahnya adalah sebagai berikut :

1. Buka Notepad++
2. Klik **File** → **Open** dan masuk ke dalam folder **C:\Users\atthar\workshop\h2o**, kemudian pilih file h2o.out dan klik Open
3. Kemudian tekan tombol **Ctrl + F** pada keyboard laptop anda
4. Ketikkan **Total Enthalpy** pada kotak Find what :, seperti yang diperlihatkan pada gambar berikut :



Maka kita akan dibawa menuju bagian yang terdapat tulisan Total Enthalpy pada file h2o.out, seperti yang diperlihatkan oleh gambar berikut :

----- ENTHALPY -----

The enthalpy is $H = U + k_B \cdot T$
 k_B is Boltzmann's constant
 Total free energy ... -76.34593735 Eh
 Thermal Enthalpy correction ... 0.00094421 Eh 0.59 kcal/mol

 Total Enthalpy ... -76.34499314 Eh

Note: Rotational entropy computed according to Herzberg
 Infrared and Raman Spectra, Chapter V,1, Van Nostrand Reinhold, 1945
 Point Group: Cs, Symmetry Number: 1
 Rotational constants in cm⁻¹: 26.406969 14.359785 9.301658
 Vibrational entropy computed according to the QRRHO of S. Grimme
 Chem.Eur.J. 2012 18 9955

Pada gambar di atas, terlihat bahwa nilai Total Enthalpy adalah **-76,34499314 Eh** atau **-76,34499314 Hartree**, di mana 1 Hartree = 2.625,50 kJ/mol, sehingga diperoleh Total Enthalpy untuk H₂O = H⁰ H₂O = **-200.443,78 kJ/mol**

Setelah memperoleh entalpi standar (H⁰) untuk H₂O, tahap selanjutnya adalah menghitung molekul H₂ dan O₂ untuk mendapatkan nilai entalpi standar (H⁰) dari H₂ dan O₂. Tahap-tahap pengerjaannya sama seperti yang telah dilakukan pada Praktikum III. Berikut diberikan contoh file input dan output perhitungan molekul H₂ dan O₂

File input H₂ :

```
# avogadro generated ORCA input file
# Basic Mode
#
! B3LYP 6-31G(D) OPT FREQ

* xyz 0 1
H -3.43506 0.68276 0.92218
H -4.04961 0.35072 1.03767
*
```

File output untuk H₂ yang memperlihatkan nilai **Total Enthalpy**

```

-----
ENTHALPY
-----

The enthalpy is  $H = U + k_B T$ 
      kB is Boltzmann's constant
Total free energy      ...      -1.15622252 Eh
Thermal Enthalpy correction  ...      0.00094421 Eh      0.59 kcal/mol
-----
Total Enthalpy      ...      -1.15527831 Eh

```

Note: Rotational entropy computed according to Herzberg
 Infrared and Raman Spectra, Chapter V,1, Van Nostrand Reinhold, 1945
 Point Group: D_{infh}, Symmetry Number: 2
 Rotational constants in cm⁻¹: 0.000000 60.565763 60.565763

Vibrational entropy computed according to the QRRHO of S. Grimme
 Chem.Eur.J. 2012 18 9955

File input O₂

```

# avogadro generated ORCA input file
# Basic Mode
#
! B3LYP 6-31G(D) OPT FREQ

* xyz 0 1
  O   -2.63364      0.02773      1.32866
  O   -3.78228      0.00868      1.39865
*

```

File output O₂ :

```

-----
ENTHALPY
-----

The enthalpy is  $H = U + k_B T$ 
      kB is Boltzmann's constant
Total free energy      ...      -150.18763390 Eh
Thermal Enthalpy correction  ...      0.00094421 Eh      0.59 kcal/mol
-----
Total Enthalpy      ...      -150.18668969 Eh

```

Note: Rotational entropy computed according to Herzberg
 Infrared and Raman Spectra, Chapter V,1, Van Nostrand Reinhold, 1945
 Point Group: D_{infh}, Symmetry Number: 2
 Rotational constants in cm⁻¹: 0.000000 1.425859 1.425859

Vibrational entropy computed according to the QRRHO of S. Grimme
 Chem.Eur.J. 2012 18 9955

Dari file output H₂ dan O₂ diperoleh H⁰ untuk H₂ dan O₂ secara berturut-turut adalah **-1,15527831 Hartree** dan **-150,18668969 Hartree** atau **-3.033,18 kJ/mol** dan **-394.315,15 kJ/mol**

Sehingga diperoleh

$$\Delta H^{\circ} \text{ reaksi} = (-200.443,78) - (-3.033,18 + (\frac{1}{2} \times -394.315,15)) = -253,02 \text{ kJ/mol}$$

Hasil eskperimen adalah **-241,8 kJ/mol**.

% error = **4,6%**

Oleh karena reaksi $\text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g})$ adalah reaksi pembentukan H₂O pada fasa gas, maka nilai $\Delta H^{\circ} \text{ reaksi}$ adalah $\Delta H^{\circ} \text{ reaksi pembentukan} = \Delta H_f^{\circ} = -253,02 \text{ kJ/mol}$

Tugas IV

Prediksikan nilai ΔH° reaksi menggunakan bantuan komputasi dengan perangkat lunak Orca untuk reaksi-reaksi berikut. Isilah tabel pada kolom Komputasi dan % eror. Semua reaksi berlangsung pada fasa gas.

Reaksi	Komputasi	Eksperimen (kJ/mol)	%error
$\text{CO} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O}$		-21,8	
$\text{H}_2\text{O} + \text{F}_2 \rightarrow \text{HOF} + \text{HF}$		-129,4	
$\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$		-165,4	
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4$		-203,9	
$\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$		-245,3	
$2\text{CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4$		-845,7	
$\text{O}_3 + 3\text{H}_2 \rightarrow 3\text{H}_2\text{O}$		-935,5	

DAFTAR PUSTAKA

Atkins, P. And Paula, J. D. Atkins' Physical Chemistry 9th Ed., Oxford University Press, 2010.

Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.2.0. <http://avogadro.cc/>.

Neese, F. (2012) The ORCA program system, Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci., 2, 73-78.

[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Chemical_Bonding/Lewis_Theory_of_Bonding/Geometry_of_Molecules](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Chemical_Bonding/Lewis_Theory_of_Bonding/Geometry_of_Molecules), diakses pada tanggal 20 Nopember 2019.