

Penggunaan Potensial Morse untuk Menjelaskan Interaksi Dua Atom untuk Membantu Proses Pembelajaran

Morse's Potential Uses to Explain the Interaction of Two Atoms to Help the Learning Process

Muhammad Nauval FR^{1*}, Triati Dewi Kencana Wungu², Widayani³

^{1*}Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung

² Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung

³ Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung

Email: mnauval@s.itb.ac.id

ABSTRAK

Panjang ikatan atau *bond length* adalah jarak antara dua atom yang berikatan dalam sebuah molekul. Panjang ikatan secara umum berbanding terbalik dengan kekuatan ikatan. Namun demikian, kita tidak bisa melihat kekuatan ikatan hanya dari panjang ikatan saja, namun harus melihat energi ikatnya pula. Secara sekilas, panjang ikatan adalah konstanta yang berasal dari pengukuran empiris ataupun diperkirakan menggunakan perhitungan numerik. Pada kenyataannya, panjang ikatan yang biasa diberikan adalah nilai panjang kesetimbangan. Pada molekul nyata, panjang ikatan antara dua buah atom sangat mungkin berubah. Kita bisa memperkirakan bagaimana interaksi antara dua buah atom hanya dengan menggunakan data panjang dan energi ikat suatu atom. Hal ini dapat dilakukan dengan menggunakan potensial Morse dengan konstantanya diisi oleh energi dan panjang ikatan atom tertentu. Sebelumnya, potensial Morse digunakan untuk menjelaskan interaksi antar atom diatomik, namun dalam artikel ini diperluas menjadi seluruh ikatan atom nonrangkap. Hasil potensial Morse yang didapat kemudian digunakan untuk mendapatkan energi interaksi serta jenis interaksi antara kedua atom. Untuk mengilustrasikannya, dituliskan program dengan Python dengan isian jenis ikatan dan jarak antaratom sembarang dan keluaran berupa potensial Morse serta jenis interaksi pada jarak tersebut. Diharapkan, penggunaan potensial Morse untuk menjelaskan interaksi antaratom cukup untuk menjelaskan bagaimana atom berikatan di dunia nyata.

Kata Kunci: energi ikat, interaksi antaratom, panjang ikatan, potensial morse

ABSTRACT

The bond length is the distance between two bonded atoms in a molecule. Bond length is generally inversely related to bond strength. However, we cannot see the strength of the bond only from the length of the bond, but we have to look at the binding energy as well. At first glance, the bond length is a constant that comes from empirical measurements or is estimated using numerical calculations. In fact, the usual bond lengths are given as equilibrium lengths. In real molecules, the bond length between two atoms is very likely to change. We can estimate the interaction between two atoms using only the data on the length and binding energy of an atom. This can be done by using the Morse potential with the constant being filled by the energy and bond length of a particular atom. Previously, the Morse potential was used to explain the interactions between diatomic atoms, but in this article it is extended to all non-binding atomic bonds. The resulting Morse potential is then used to obtain the energy of the interaction and the type of interaction between the two atoms. To illustrate this, a program is written in Python with the type of bond and distance between arbitrary numbers and the output is the Morse potential and the type of interaction at that distance. Hopefully, Morse's use of potential to explain interactions between atoms would be sufficient to explain how atoms bond in the real world.

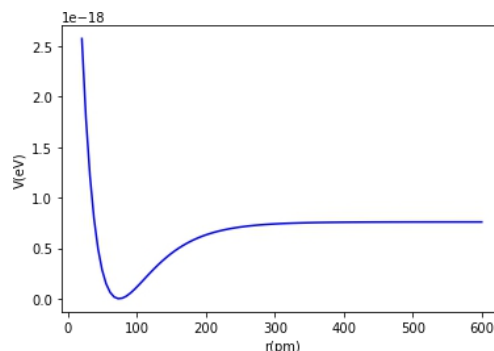
Keyword: binding energy, interactions between atomic, bond length, morse potential

PENDAHULUAN

Panjang ikatan atau *bond length* adalah jarak antara dua atom yang berikatan dalam sebuah molekul. Secara umum, semakin lemah panjang ikatan, maka semakin lemah kekuatan ikatannya. Pada kenyataannya, panjang ikatan tidak dapat dijadikan ukuran kekuatan ikatan. Kekuatan ikatan dapat diperkirakan hanya dengan melihat panjang dan energi ikat (Kaupp, Danovich, & Shaik, 2017). Keduanya didapatkan dari eksperimen dan dapat diperkirakan menggunakan komputasi molekul, misalnya DFT (Tamukong, Khait, & Hoffmann, 2017).

Sekilas, energi dan panjang ikatan adalah besaran yang tetap. Pada kenyataannya, energi dan panjang ikatan yang diberikan adalah energi dan panjang ikatan dalam kesetimbangan. Interaksi dalam dan luar molekul dapat mengubah nilai keduanya (Zhao, Gong, & Yang, 2005). Secara sekilas pula, energi ikat dan panjang ikatan hanya memberikan informasi mengenai kekuatan ikatan. Namun, kedua nilai ini memberikan informasi lengkap mengenai bagaimana dua buah atom berinteraksi. Jenis interaksi kedua buah atom tergantung pada jaraknya. Jika jarak antara kedua atom sangat dekat, maka akan ada gaya tolak menolak yang sangat kuat. Kekuatan gaya ini kemudian menurun hingga suatu titik yang disebut titik kesetimbangan.

Pada titik ini, energi interaksi antar kedua atom berada pada level terendah dan kedua atom dapat dikatakan berikatan. Jika jarak antar kedua atom terus bertambah, maka kedua atom memiliki gaya Coulomb yang tarik-menarik hingga pada suatu titik, gaya ini menghilang dan bisa dikatakan tidak ada interaksi antar keduanya (Zhang, Liu, Zhang, Zhou, & Jia, 2012)



Gambar 1. Kurva energi interaksi antar atom terhadap jarak.

Untuk bisa mendapatkan kurva seperti Gambar 1, salah satu metode yang biasa dipakai adalah menggunakan nilai panjang dan energi ikat molekul sebagai konstanta di rumusan Potensial Morse.

Potensial Morse adalah fungsi empiris yang menggambarkan energi potensial antara dua atom pada molekul diatomic (Zhang et al., 2012) Fungsi ini terkenal karena mampu menjelaskan, menggunakan rumus analitik yang relatif mudah, bagaimana perilaku suatu molekul. Potensial Morse sendiri berbentuk seperti pada rumus (1) (Kaupp, Danovich, & Shaik, 2017).

$$V(r) = D_e \quad (1)$$

dengan D_e , a , r_e adalah konstanta, sementara r adalah jarak antar atom. Nilai konstanta biasanya ditentukan dengan *fitting* kurva spektroskopi.

Fungsi Morse pertama ditemukan tahun 1929 oleh P.M Morse. Pada zaman sekarang, fungsi Morse yang dimodifikasi sehingga memasukkan banyak faktor *fitting* banyak dipakai dalam spektroskopi. Terdapat banyak jenis modifikasi fungsi Morse sehingga lebih akurat dalam *fitting*, contohnya fungsi Rosen-Morse (Tang, Liang, Zhang, Zhao, & Jia, 2014)

dan fungsi potensial Morse berputar (Nasser, Abdelmonem, Bahlouli, & Alhaidari, 2007).

Mengingat hal-hal di atas, maka dipandang perlu menggunakan Potensial Morse untuk menjelaskan interaksi antaratom dengan lebih baik. Untuk membantu mengilustrasikannya, maka dibuat program dengan Python dengan masukan jenis dan jarak antaratom dan keluaran potensial Morse beserta jenis interaksi.

Potensial Morse pada umumnya dipakai hanya untuk menjelaskan energi molekul diatomik. Pada artikel ini, karena energi ikat hanya meninjau dua atom berikatan dan mengabaikan molekul lainnya, maka potensial Morse dapat digunakan untuk seluruh ikatan atom dengan satu ikatan. Untuk ikatan atom ganda/lipat tiga (*double/triple bond*), potensial ini tidak dapat digunakan karena faktor yang mempengaruhi lebih rumit.

METODE PENELITIAN

Metode penelitian adalah program perhitungan dengan Python. Masukan yang diberikan adalah jenis ikatan dan jarak antar atom (1-1000 pm). Nilai D_e adalah nilai energi ikat referensi, r_e adalah panjang ikatan referensi, dan a akan ditentukan sesuai referensi. Hal ini karena a menentukan lebar dari potensial Morse, dan biasanya didapat dari *fitting*. Untuk energi dan panjang ikatan, akan digunakan referensi CCCDB NIST (cccdb.nist.gov), sementara untuk konstanta a didapat dari rumusan

$$a = \sqrt{\frac{k}{2D_e}} \quad (2)$$

k adalah nilai konstanta pegas. Konstanta pegas dihitung menggunakan rumus

$$k = \frac{F}{\Delta x} \quad (3)$$

dimana c adalah kecepatan cahaya, μ adalah massa tereduksi, dan ν adalah frekuensi vibrasi eksperimen. Nilai ν didapat dari CCCDB NIST. Satuan jarak adalah pm, dan satuan potensial Morse adalah kJ/mol.

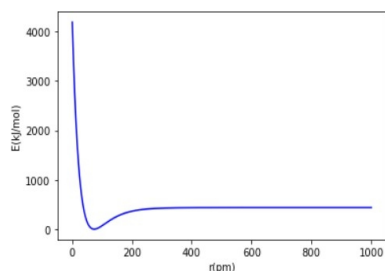
Program menerima masukan berupa jenis ikatan yang diinginkan (satu atau dua) dan jarak antaratom yang diinginkan untuk setiap ikatan. Kemudian, dengan *library* matplotlib, program akan menggrafikkan Potensial Morse untuk ikatan yang diinginkan.

Untuk menentukan jenis ikatan, pertama dihitung nilai potensial Morse untuk jarak antaratom yang diinginkan, lalu dihitung nilai potensial Morse untuk jarak 1 pm lebih kecil (potensial A) dan lebih besar (potensial B) dari jarak antaratom masukan, dan dibandingkan. Jika potensial morse masukan lebih kecil dari potensial A dan lebih besar dari potensial B, maka jarak antaratom berada pada posisi menurun pada lembah (lihat Gambar 1) dan jenis interaksi tolak-menolak. Jika potensial Morse masukan lebih besar dari potensial A dan lebih kecil dari potensial B, maka jarak antaratom berada pada posisi menanjak keluar lembah dan interaksi adalah interaksi Coulomb (tarik menarik). Jika potensial A dan B sama-sama lebih besar, maka berada di dasar lembah yang berarti berada di nilai energi ikat dan panjang ikatan kesetimbangan. Jika beda potensial masukan dengan potensial A dan B hanya 0.01, maka ditetapkan sudah tidak ada lagi interaksi diantara keduanya. Keluaran program adalah kurva potensial Morse untuk satu atau lebih ikatan dan jenis interaksinya.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Untuk masukan pertama, digunakan ikatan H-H dengan parameter $D_e = 436$ kJ/mol, $r_e =$

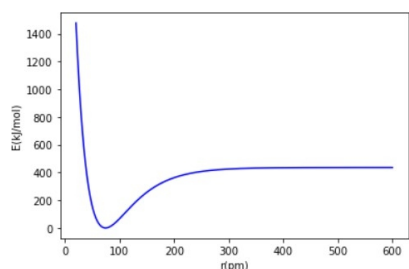
74,1 pm, dan $\alpha = 0,0193$ (Roy, 2014) Panjang ikatan masukan adalah 10 pm. Sebagai catatan, pada referensi yang digunakan satuan panjang adalah angstrom. Keluaran disajikan di Gambar 2.



Interaksi Tolak Menolak

Gambar 2. Hasil penggrafikan energi ikat dan panjang ikatan H-H dengan potensial Morse.

Kita dapat menyimpulkan beberapa hal. Pertama, rumusan Potensial Morse memberikan bentuk kurva sebagaimana yang diharapkan (sesuai pada gambar (1)). Kedua, lembah kurang terlihat jelas, karena penggrafikan pada sumbu x menggunakan jarak yang sangat jauh (hingga 1000 pm). Oleh karena itu, harus dilakukan perbaikan sumbu x sehingga kurva yang ditampilkan lebih representative. Kurva yang sudah diperbaiki disajikan di gambar 3:



Gambar 3. Hasil penggrafikan energi ikat dan panjang ikatan H-H an H-F

Perlu dicatat bahwa perbaikan dilakukan secara manual, sehingga ke depannya dapat diimplementasikan *scaling* otomatis agar menampilkan hasil optimal.

Kita juga bisa mengidentifikasi jenis interaksi antar atom dan nilai potensialnya (belum ditampilkan) di sembarang jarak. Karena jarak yang dipakai adalah 10 pm, maka program menyimpulkan interaksi adalah tolak menolak. Hal ini sesuai dengan ekspektasi.

Dengan potensial Morse, kita dapat mengidentifikasi pula sampai sejauh mana dua buah atom mengalami interaksi, yaitu jarak antara dasar lembah dan bagian datar pada Potensial Morse. Tabel keluaran identifikasi jenis interaksi disajikan di Tabel 1.

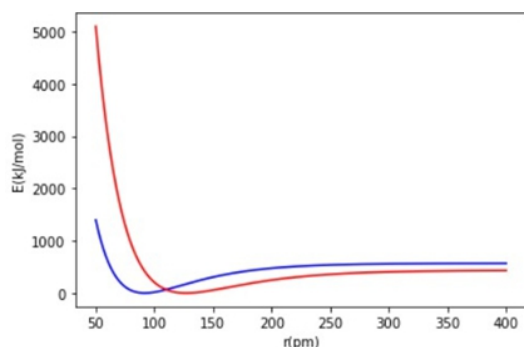
Tabel 1. Jenis interaksi pada ikatan atom H-H untuk sembarang jarak

Jarak (pm)	KeluaranProgram
10	Interaksi Tolak Menolak (ITM)
30	ITM
70	ITM
75	InteraksiCoulomb (IC)
100	IC
200	IC
300	Tidak Ada Interaksi
400	Tidak AdaInteraksi

Dari data Tabel 1, kita bisa menyimpulkan daerah interaksi Coulomb antar dua atom berada pada jarak 75-200 pm.

Selain menggrafikkan 1 potensial Morse, program juga dirancang agar dapat menggrafikkan beberapa potensial Morse. Pada Gambar 4, disajikan potensial Morse untuk H-H dan H-F dengan parameter diambil dari referensi

(Roy, 2014) Panjang ikatan masukan adalah 10 pm (H-H) dan 350 pm (H-F).



Interaksi Tolak Menolak
Tidak ada Interaksi

Gambar 4. Hasil penggrafikan energi ikat dan panjang ikatan H-H dengan potensial Morse yang telah diperbaiki. Potensial Morse H-H : biru, H-F : merah.

Hasil penggrafikan juga memberikan hasil yang relatif sesuai dengan ekspektasi. Hal menarik yang dapat diamati adalah daerah interaksi untuk ikatan H-F tampak lebih panjang dari interaksi untuk H-H. Artinya, atom H dan F harus berada pada jarak yang lebih jauh lagi untuk membuat mereka tidak berinteraksi. Jika dihubungkan dengan keelektronegatifan, maka unsur fluorine memang memiliki nilai keelektronegatifan paling tinggi, sehingga ia mampu menarik elektron bersama dalam ikatan kovalen.

KESIMPULAN

Dari hasil penelitian, kita bisa menyimpulkan beberapa hal. Pertama, kita dapat menggrafikkan nilai panjang ikatan dan

energi ikatan menggunakan Potensial Morse, mengubah makna keduanya menjadi kedua nilai yang dapat menggambarkan keadaan suatu ikatan diatomic. Kedua, kita dapat menentukan bagaimana atom berinteraksi dan berapa potensialnya untuk jarak sembarang dengan potensial Morse. Terakhir, kita dapat memperkirakan sampai sejauh mana dua buah atom berinteraksi dengan melihat keluaran program untuk jarak yang makin jauh, sehingga program mengeluarkan keluaran 'Tidak Ada Interaksi'.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Kementerian Pendidikan dan Kebudayaan RI atas Dana Hibah Penelitian Dasar Unggulan Perguruan Tinggi Tahun 2020.

DAFTAR PUSTAKA

- Kaupp, M., Danovich, D., & Shaik, S. (2017). Chemistry is about energy and its changes : A critique of bond-length / bond-strength correlations. *Coordination Chemistry Reviews*, 344, 355–362.
- Nasser, I., Abdelmonem, M. S., Bahlouli, H., & Alhaidari, A. D. (2007). The rotating Morse potential model for diatomic molecules in the tridiagonal Jmatrix representation: I. Bound states. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40(21), 4245–4257.
- Roy, A. K. (2014). Ro-vibrational spectroscopy of molecules represented by a Tietz-Hua oscillator potential. *Journal of Mathematical Chemistry*, 52(5), 1405–1413.



JIFP

(Jurnal Ilmu Fisika dan Pembelajarannya)

<http://jurnal.radenfatah.ac.id/index.php/jifp/index>

Vol. 5, No. 1, Juni 2021, 8 - 13

ISSN
(online):
**2549-
6158**

ISSN (print):
**2614-
7467**

- Tang, H. M., Liang, G. C., Zhang, L. H., Zhao, F., & Jia, C. S. (2014). Molecular energies of the improved Rosen-Morse potential energy model. *Canadian Journal of Chemistry*, 92(3), 201–205.
- Zhang, G. D., Liu, J. Y., Zhang, L. H., Zhou, W., & Jia, C. S. (2012). Modified Rosen-Morse potential energy model for diatomic molecules. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 86(6), 1–6.
- Zhao, D., Gong, L., & Yang, Z. (2005). The Relations of Bond Length and Force Constant with the Potential Acting on an Electron in a Molecule The Relations of Bond Length and Force Constant with the Potential Acting on an Electron in a Molecule.