

**DEPENDENSI ISOMERISASI KATALISTIK TRANS-HCOH
KE H_2CO TERHADAP JUMLAH MOLEKUL H_2O**

SKRIPSI



AYU POERNOMO

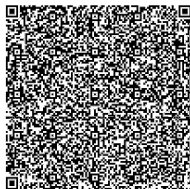
**PROGRAM STUDI SARJANA FISIKA
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA
2022**

LEMBAR PENGESAHAN NASKAH SKRIPSI

Judul : Dependensi Isomerisasi Katalistik trans-HCOH ke H₂CO Terhadap Jumlah Molekul H₂O
Penyusun : Ayu Poernomo
NIM : 081711333094
Nama Pembimbing I : FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.
Nama Pembimbing II : HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D
Tanggal Seminar : 18-08-2022 9:00 AM

Disetujui Oleh:

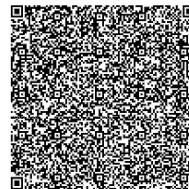
Pembimbing 1



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 197902062008011004

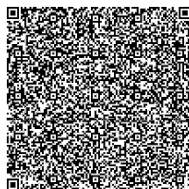
Pembimbing 2



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

Mengetahui,
Ketua Departemen Fisika
Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Airlangga



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

LEMBAR PERNYATAAN SKRIPSI

SKRIPSI

Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Sains Bidang S1 FISIKA
Pada Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Airlangga

Oleh:

Ayu Poernomo

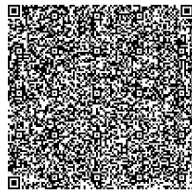
081711333094

Tanggal Lulus:

18-08-2022

Disetujui Oleh:

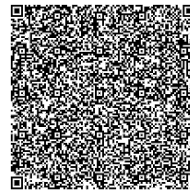
Pembimbing 1



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 197902062008011004

Pembimbing 2



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

THESIS VALIDATION SHEET

Title : Dependensi Isomerisasi Katalistik trans-HCOH ke H₂CO Terhadap Jumlah Molekul H₂O
Author : Ayu Poernomo
Student Number : 081711333094
Primary Supervisor : FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.
Secondary Supervisor : HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D
Thesis Defense Date : 18-08-2022 9:00 AM

Approved By:

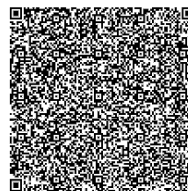
Primary Supervisor



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 197902062008011004

Secondary Supervisor



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

Knowing,
Head of Physics Department
Faculty of Science and Technology
Universitas Airlangga



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

THESIS STATEMENT SHEET

THESIS

As One of the Requirements for Obtaining a Bachelor of Science Degree in S1 FISIKA at
the Faculty of Science and Technology, Universitas Airlangga

Written By:

Ayu Poernomo

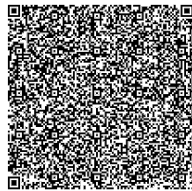
081711333094

Thesis Defense Date:

18-08-2022

Approved By:

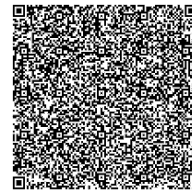
Primary Supervisor



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 197902062008011004

Secondary Supervisor



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

SURAT PERNYATAAN ORISINALITAS

Yang bertanda tangan dibawah ini, saya:

Nama : Ayu Poernomo
Nomor Induk Mahasiswa : 0817 11 333 094
Program Studi : S-1 Fisika
Fakultas : Sains dan Teknologi
Jenjang : Strata-1 (S-1)

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan tindakan plagiat dalam penulisan naskah tugas akhir saya yang berjudul:

Dependensi Isomerisasi Katalistik trans-HCOH ke H_2CO Terhadap Jumlah Molekul H_2O

Apabila suatu saat saya terbukti melakukan tindakan plagiat, maka saya bersedia menerima sanksi yang telah ditetapkan.

Surabaya, 26 Agustus 2022

Penulis,



Ayu Poernomo
081711333094

Penyusun persembahkan skripsi ini
untuk Ibu dan Ayah
Nurul Aisyah dan Hery Poernomo

PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI

Skripsi ini tidak dipublikasikan, namun tersedia di perpustakaan dalam lingkungan Universitas Airlangga.

Skripsi ini diperkenankan untuk dipakai sebagai referensi kepustakaan, tetapi pengutipan harus seizin penyusun dan harus menyebutkan sumbernya sesuai kebiasaan ilmiah.

Dokumen skripsi ini merupakan hak milik Universitas Airlangga.

PRAKATA

Penelitian ini adalah tugas akhir yang dilakukan untuk syarat kelulusan di program studi sarjana Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga.

Tugas akhir ini memodelkan isomerisasi katalistik trans-HOCH ke H_2CO terhadap jumlah molekul H_2O . Dilakukan kalkulasi berbasis *density functional theory* (DFT) untuk mengidentifikasi keadaan awal, keadaan transisi, dan keadaan akhir. Selisih energi pada keadaan transisi dan keadaan awal memberikan penghalang energi. Nilai penghalang energi menjadi evaluasi utama untuk menilai efek penambahan molekul H_2O .

Tugas akhir ini terdiri dari lima bab utama dan dua bab lampiran. Bab 1 fokus pada rumusan masalah. Bab 2 berisi ulasan literatur-literatur yang dibutuhkan. Bab 3 fokus pada metode tugas akhir. Bab 4 berisi hasil dan pembahasan. Bab 5 berisi kesimpulan dan saran dari tugas akhir ini. Sedangkan Lampiran A merupakan implementasi DFT dalam Gaussian dan Lampiran B berisi rutin kalkulasi yang digunakan pada tugas akhir ini.

Semoga tugas akhir ini dapat memberikan manfaat untuk civitas akademika Universitas Airlangga.

Tabik,

Ayu Poernomo

LEMBARAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak berikut yang telah membantu dalam penyusunan tugas akhir ini.

1. Dr. Febdian Rusydi selaku guru dan pembimbing yang dengan sabar memberikan waktu, tenaga, dan pikiran untuk membimbing sehingga tugas akhir ini selesai.
2. Dr. Herri Trilaksana selaku pembimbing yang telah memberikan bimbingan.
3. Dr. Andi Hamim Zaidan selaku penguji yang telah memberikan kritikan dan saran yang membangun.
4. Nurul Fitriyah, M.Sc. selaku penguji yang telah memberikan evaluasi untuk tugas akhir ini.
5. Dr. Ira Puspitasari yang telah meluangkan waktu untuk berdiskusi mengenai tugas akhir ini.
6. Etika Dessi Susanti, S.Si. yang telah memberikan sejumlah pemahaman baru untuk penyempurnaan analisis data.
7. Daniel Elisandro, S.Si. yang telah membantu dalam penulisan.
8. Siti Nurun Nafisah, Rayhan Fakhriza Mardana Putra, Melani Yulia Si-anggi, Alfaya Putri Farikha, dan Kevin Yusuf Briliatama sebagai teman seperjuangan dalam pengerjaan tugas akhir.
9. RaIHANA yang telah membantu dalam mempersiapkan kebutuhan si-dang.
10. Catharina Risti Indriyani, S.Si. dan Maria Anggraini Aristianingrum, S.Si. yang senantiasa membersamai.

ABSTRAK

Fenomena *quantum tunneling* tidak umum dialami oleh sebuah molekul. Schreiner et al. menengarai isomerisasi trans-HCOH ke H₂CO pada temperatur 11 K lewat mekanisme *quantum tunneling*. Isomerisasi ini terjadi pada fase gas sehingga penghalang energi bagi atom H pindah posisi dari O ke C tinggi. Pengujian *quantum tunneling* pada molekul hanya dapat dilakukan secara teoretis. Tugas akhir ini bertujuan untuk mendapatkan korelasi penghalang energi isomerisasi trans-HCOH ke H₂CO dengan tingkat konsentrasi trans-HCOH dalam air. Molekul H₂O yang digunakan adalah 1, 2, dan 3. Penghalang energi diperoleh dengan kalkulasi berbasis *density functional theory* (DFT). Kalkulasi DFT digunakan untuk mendapatkan keadaan dasar dan keadaan transisi. Penghalang energi untuk penambahan 1, 2, dan 3 molekul H₂O berturut-turut adalah = -0,26 eV, -0,88 eV, dan -0,87 eV. Terjadi penurunan penghalang energi yang signifikan pada penambahan dua molekul H₂O yaitu 2,31 eV. Penurunan tersebut mengindikasikan bahwa molekul H₂O berperan sebagai katalis pada isomerisasi trans-HCOH ke H₂CO. Selain itu, isomerisasi terjadi secara spontan. Hal tersebut mengindikasikan bahwa isomerisasi trans-HCOH ke H₂CO tidak akan memilih lewat *quantum tunneling*, tetapi lewat jalur yang memanfaatkan air.

Kata kunci: Isomerisasi, *Density Functional Theory*, *Quantum Tunneling*, Struktur Elektronik

ABSTRACT

The phenomena of quantum tunneling is unusual experienced by a molecule. Schreiner et al. stated isomerization trans-HCOH to H₂O at the temperature of 11 K through quantum tunneling mechanism. This isomerization happened at gases phase, so the H atoms energy barrier changed from O to C high. Quantum tunneling calibration at molecules only could achieved theoretically. This undergraduate thesis aims to get the correlation of isomerization energy barrier trans-HCOH to H₂O with trans concentration level trans-HCOH in the water. The total used H₂O molecules are 1, 2, and 3. Energy barriers are obtained by calculation based on density functional theory (DFT). DFT calculation is used to gain ground state and transition state. The energy barrier to addition of 1, 2, 3 H₂O molecules consecutively are = -0,26 eV, -0,88 eV, and -0,87 eV. The energy barrier dropped significantly at the addition of two H₂O molecules, which is 2,31 eV. This reduction indicates that H₂O molecules functionate as a catalyst at isomerization trans-HCOH to H₂O. On the other hand, it indicates that isomerization trans-HCOH to H₂O would not choose to be through quantum tunneling but from how it utilizes water.

Keywords: Isomerization, Density Functional Theory, Quantum Tunneling, Electronic Structure

DAFTAR ISI

Pedoman Penggunaan Skripsi	ii
Prakata	iii
Lembaran Terima Kasih	iv
Abstrak (versi Bahasa Indonesia)	v
Abstract (English version)	vi
1 Pendahuluan	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Pertanyaan Penelitian	3
1.3 Rumusan Masalah	3
1.4 Tujuan	3
1.5 Batasan Masalah	4
1.6 Manfaat	4
2 Tinjauan Pustaka	6
2.1 Probabilitas Quantum Tunneling oleh Pendekatan WKB . . .	6
2.2 Kasus Isomerisasi trans-HCOH ke H ₂ CO Lewat Quantum Tunneling	9
2.3 Studi Komputasi Isomerisasi trans-HCOH ke H ₂ CO Lewat Quantum Tunneling	11
2.4 Studi Komputasi Isomerisasi trans-HCOH ke H ₂ CO Lewat Quantum Tunneling dalam Pelarut Air	13
2.5 Larutan sebagai Katalis	14
3 Metode Tugas Akhir	17
3.1 Diagram Alir Tugas Akhir	17
3.2 Waktu dan Tempat Pengerjaan	21
4 Hasil dan Pembahasan	23
4.1 Rancangan Jalur Isomerisasi	23

<i>DAFTAR ISI</i>	viii
4.2 Optimisasi Keadaan Dasar	25
4.3 Optimisasi Keadaan Transisi	27
4.4 Tinggi Penghalang Energi	31
4.5 Efek Penambahan Molekul H ₂ O	32
5 Kesimpulan dan Saran	34
5.1 Kesimpulan	34
5.2 Saran	34
Bibliografi	35
A Implementasi DFT dalam Gaussian	37
B Rutin Kalkulasi	38
B.1 Rutin Kalkulasi	38
B.1.1 Rutin 1: Optimisasi Keadaan Dasar	38
B.1.2 Rutin 2: Optimisasi Keadaan Transisi	38

DAFTAR GAMBAR

1.1	Fokus dan peta RC $\diamond$ QED	5
2.1	Ilustrasi isomerisasi trans-HCOH ke H ₂ CO	7
2.2	Perubahan fungsi gelombang	8
2.3	Energi potensial Gamow	9
2.4	Sketsa jalur isomerisasi hasil kalkulasi DFT	13
2.5	Jalur isomerisasi tanpa dan dengan katalis.	15
2.6	Hasil kalkulasi geometri kompleks aktif HCOH-NH ₂ O	16
2.7	Plot puncak penghalang energi isomerisasi	16
3.1	Diagram alir yang dipakai pada tugas akhir ini.	20
4.1	DLE quantum spin state singlet (1) dan triplet (2).	26
4.2	Geometri keadaan dasar pada $N = 0$	27
4.3	Geometri keadaan dasar pada $N = 1$	28
4.4	Geometri keadaan dasar pada $N = 2$	28
4.5	Geometri keadaan dasar pada $N = 3$	28
4.6	DLE berdasarkan energi elektronik total pada $N = 0$	29
4.7	DLE berdasarkan energi elektronik total pada $N = 1$	30
4.8	DLE berdasarkan energi elektronik total pada $N = 2$	30
4.9	DLE berdasarkan energi elektronik total pada $N = 3$	30
4.10	Grafik penghalang energi (eV) terhadap N	32
B.1	Rutin 1 untuk trans-HCOH singlet	39
B.2	Rutin 1 untuk H ₂ CO singlet	39
B.3	Rutin 1 untuk H ₂ O singlet	39
B.4	Rutin 1 untuk 2H ₂ O	40
B.5	Rutin 1 untuk 3H ₂ O	40
B.6	Rutin 1 untuk trans-HCOH triplet	41
B.7	Rutin 1 untuk H ₂ CO triplet	41
B.8	Rutin 1 untuk H ₂ O triplet	41
B.9	Rutin 2 untuk $N = 0$	42
B.10	Rutin 2 untuk $N = 1$	42
B.11	Rutin 2 untuk $N = 2$	43

<i>DAFTAR GAMBAR</i>	x
B.12 Rutin 2 untuk $N = 3$	43

DAFTAR TABEL

2.1	Hasil eksperimen dan kakulasi	10
3.1	Aktivitas dan waktu pengerjaan tugas akhir	22
4.1	Parameter struktur geometri molekul H_2CO dan H_2O	26