

- DISSOCIATION

- O₂ MOLEKUL OKSIGEN

**PERHITUNGAN AB-INITIO ENERGI DISOSIASI
MOLEKUL OKSIGEN (O₂)**

KK
MPF 23/02

SKRIPSI

Suy
P



MILIK
PERPUSTAKAAN
UNIVERSITAS AIRLANGGA
SURABAYA

HAFID SUYUTI

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS AIRLANGGA
SURABAYA
2002**

**PERHITUNGAN *AB-INITIO* ENERGI DISOSIASI
MOLEKUL OKSIGEN (O₂)**

SKRIPSI

**Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh
Gelar Sarjana Sains Bidang Fisika Pada Fakultas Matematika dan
Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Airlangga**

Oleh :

HAFID SUYUTI
NIM. 089611557

Tanggal Lulus : 4 Juli 2002



Disetujui Oleh :

Pembimbing I

A handwritten signature in black ink, appearing to be "Adri Supardi".

Drs. Adri Supardi, M.Sc.
NIP. 131 569 373

Pembimbing II

A handwritten signature in black ink, appearing to be "Aminatun".

Ir. Aminatun, M.Si.
NIP. 132 049 209

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

Judul : Perhitungan *Ab-Initio* Energi Disosiasi Molekul Oksigen
(O₂)
Penyusun : Hafid Suyuti
NIM : 089611557
Tanggal Ujian : 4 Juli 2002

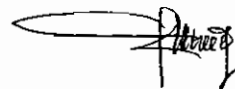
Disetujui Oleh :

Pembimbing I



Drs. Adri Supardi, M.Sc.
NIP. 131 569 373

Pembimbing II



Ir. Aminatun, M.Si.
NIP. 132 049 209

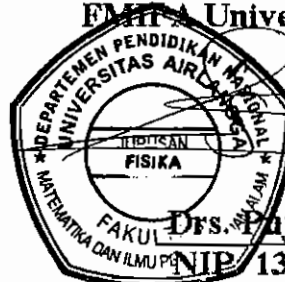
Mengetahui,

Dekan Fakultas MIPA
Universitas Airlangga



Drs. H. Abdul Latief Burhan, MS
NIP. 131 286 709

Ketua Jurusan Fisika
FMIPA Universitas Airlangga



Drs. Pujiyanto, MS
NIP. 131 756 001

Hafid Suyuti, 2002, **Perhitungan Ab-Initio Energi Disosiasi Molekul Oksigen (O₂)**. Skripsi ini dibawah bimbingan Drs. Adri Supardi, M.Sc. dan Ir. Aminatun, M.Si. Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Airlangga.

ABSTRAK

Perkembangan perangkat keras maupun lunak teknologi komputasi yang pesat, semakin mempermudah user dalam menunjang keperluannya, terutama user yang bergerak di bidang sains yang dapat memanfaatkannya untuk mendapatkan solusi persamaan-persamaan matematis yang hampir atau bahkan tidak mungkin diselesaikan dengan cara biasa. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan nilai energi disosiasi molekul oksigen yang dihitung menggunakan metode SCF – LCAO – MO dengan memanfaatkan program yang dibuat oleh Alex Granovsky dkk.

Dengan memasukkan semua input yang diperlukan ke dalam program akan diperoleh beberapa parameter energi dari molekul yang diharapkan. Bila parameter input yang berupa jarak antar atom molekul oksigen divariasikan akan diperoleh suatu kurva yang mempunyai nilai minimum tertentu, yang disebut sebagai energi minimum. Pada jarak itulah molekul oksigen akan memperoleh kesetimbangan. Hasil dari beberapa parameter energi yang berbentuk kurva tadi diolah sedemikian rupa sehingga diperoleh suatu persamaan yang mana dari persamaan itu dapat diperoleh nilai frekuensi vibrasi maupun energi vibrasi, yang akhirnya digunakan untuk menentukan energi disosiasi molekul oksigen.

Hasil dari penelitian ini menunjukkan beberapa parameter molekul oksigen antara lain: jarak kesetimbangan 1,23 angstrom, energi minimum 142,8773 eV, energi ikat elektronik minimum 0,635 eV, frekuensi vibrasi $4,413 \cdot 10^{13}$ rad/s, energi vibrasi $9,129 \cdot 10^{-2}$ eV, dan energi disosiasi 0,5437 eV.

Kata Kunci: Energi Disosiasi, Perhitungan *ab-initio*, Molekul Oksigen.

Hafid Suyuti, 2002, **Ab-Initio Calculation of Dissociation Energy of Oxygen Molecule (O₂)**. Final Project was guidance by Drs. Adri Supardi, M.Sc. and Ir. Aminatun, M.Si. Physics Department, Mathematic and Natural Science Faculty of Airlangga University.

ABSTRACT

The amazing development of computational hardware and software, have given great contribution for the user more and more. Especially by the scientist who makes use of it to get obtain solution of mathematical equation that almost or ever enable to solve by usual method. This research is aimed to get value of oxygen dissociation energy that is calculated by SCF – LCAO – MO method using program created by Alex Granovsky et. al.

By include required input to the program will be produced some of expected parameters of energies. If the bond length of oxygen molecular input parameters are variated and combined, it will be established a certain minimum curve of graph called minimum energy. The equilibrium of oxygen molecule will be formed in this distance. The result of some energy parameters curve of graph are processed in such a way that produced equation with vibration frequency and vibration energy, and finally can be used to expect dissociation energy of oxygen molecule.

The results of this research like bond length is 1,23 angstrom, minimum energy is 142,8773 eV, minimum bonding energy is 0,635 eV, vibration frequency is 4,413 10^{13} rad/s, vibration energy is 9,129 10^{-2} eV, and dissociation energy is 0,5437 eV.

Key words: Dissociation Energy, *Ab-initio* Calculation, Oxigen Molecule.