

Model dan Visualisasi Struktur Molekular Organik Ikatan Sederhana $p - p$ dan $s - p$ Hibrida

Hubertus Ngaderman^{*1}, Ego Srivajawaty Sinaga², Daniel Napitupuli³

^{1,2,3}Universitas Cenderawasih

*ngadermanh@gmail.com

ABSTRACT

The main objective of this research is to model the structure of s-p hybrid organic molecules. In order to model and visualize such complex structures, we first present a fundamental concept in quantum mechanics which is expressed explicitly by the wave function ψ . From the wave function ψ , we understand the simplest molecular structure, namely H_2 . Visualization of the H_2 molecule has been made and further for other covalent bonds, namely p-p bonds (N_2, O_2 and F_2), s-p bonds (HF, H_2O and NH_3) and s-p hybrid bonds (CH_4, C_2H_4 and C_6H_6). The concept of the H_2 molecule is the simplest and most basic concept in understanding the most complex structures in organic molecular bonds. Here the complex structure is an s-p hybrid bond. One example of such a bond is benzene C_6H_6 . After understanding the above study, it is hoped that the fundamental phenomenon, namely electrical conductivity in organic materials, can be understood.

Keywords: organic molecules; molecular visualization; hybrid bond

ABSTRAK

Tujuan utama dari riset ini adalah memodelkan struktur molekul organik hibrida $s - p$. Untuk memodelkan dan memvisualisasikan struktur rumit tersebut, pertama-tama dihadirkan konsep mendasar didalam mekanika kuantum yang dinyatakan secara eksplisit dengan fungsi gelombang ψ . Dari fungsi gelombang ψ maka struktur molekul paling sederhana yaitu H_2 kita pahami. Visualisasi molekul H_2 telah dibuat dan selanjutnya untuk ikatan kovalen lainnya yaitu ikatan $p - p$ (N_2, O_2 dan F_2), ikatan $s - p$ (HF, H_2O dan NH_3) dan ikatan hibrida $s - p$ (CH_4, C_2H_4 dan C_6H_6). Konsep molekul H_2 adalah konsep paling sederhana dan dasar didalam memahami struktur paling rumit didalam ikatan molekular organik. Disini struktur rumit tersebut adalah ikatan hibrida $s - p$. Salah satu contoh ikatan tersebut adalah benzena C_6H_6 . Sesudah memahami kajian diatas maka fenomena mendasar yaitu konduktivitas listrik didalam material organik diharapkan dapat dipahami.

Kata kunci: molekul organik; visualiasasi molekul; ikatan hibrida

This is an open-access article under the [CC-BY-SA](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) license



1. Pendahuluan

Beberapa tahun terakhir telah dikembangkan secara intensif sel surya dengan bahan semikonduktor organik atau yang dikenal dengan sel surya organik (yang selanjutnya disingkat menjadi SSO). Dalam hal ini SSO mempunyai potensi sebagai piranti pengkonversi energi yang lebih murah dan mudah dalam fabrikasinya jika dibandingkan dengan sel surya anorganik. Selain itu, rekayasa hingga level molekuler dan sintesis bahan semikonduktor organik juga tidak terbatas, bahkan dapat diekstraksi dari tumbuh-tumbuhan yang dapat dibudidayakan[1].

Pengembangan SSO makin pesat akhir-akhir ini karena juga dipicu oleh keberhasilan pengembangan divais LED organik (OLED) yang sudah memasuki tahap komersial. Dua jenis SSO saat ini meliputi SSO lapisan tipis (Stubinger 2001) serta dyes sensitizer solar cell atau DSSC (Widiyanti et al, 2007). SSO lapisan tipis sendiri juga terdiri dari beberapa jenis struktur, antara lain adalah SSO bulk (Monestier et al, 2007) dan SSO heterojunction[2].

Hingga saat ini efisiensi konversi SSO pada umumnya masih di bawah ambang komersial 5%. Beberapa kajian untuk meningkatkan efisiensi SSO telah dilakukan meliputi kajian bahan baru (Xue et al, 2004; Gruber et al, 2005) dan kajian struktur divais (Koehler et al, 2004; Marsh et al, 2007).

Xue et al (2004) melaporkan bahwa efisiensi 4,2% bisa tercapai dengan memanfaatkan bahan baru fullerene (C60) sebagai lapisan tipe-n. Sementara itu, **Monestier et al, 2007** melaporkan efisiensi 4,4% SSO berstruktur bulk. Dua laporan terakhir tersebut memberikan motivasi bahwa tidak lama lagi efisiensi SSO akan segera memasuki tahap komersial [3].

Sebagai bidang kajian yang baru, banyak mekanisme fisis SSO yang belum dapat difahami. Masalah mekanisme fisis SSO tersebut yang belum dapat dipahami yaitu karena material organik (yang merupakan bahan utama dalam SSO) belum dikaji secara mendalam. Sifat-sifat konduktivitas listrik material organik belum dipahami, begitu pula mobilitas pembawa didalam material organik juga belum dipahami secara komprehensif. Sebab-sebab belum dapat dipahami oleh karena para fisikawan jarang melakukan penelitian mengenai konduktivitas elektrik material organik. Material organik tersebut dianggap isolator sebab memang material organik adalah isolator. Tetapi pada tahun 1977 Hagar dan McDiarmid menemukan bahwa material organik tersebut memiliki sifat-sifat konduktor (lebih tepatnya semikonduktor).

Sifat penghantaran elektrik didalam material organik muncul dari pembawa didalam material organik tersebut. Pembawa tersebut tidak bisa disamakan dengan elektron bebas didalam logam, sebab material organik tidak mempunyai elektron valensi (elektron bebas). Konduktivitas didalam material organik diduga oleh molekul yang bermuatan. Berbeda dengan konduktor yang memiliki pita valensi dan pita konduksi, didalam material organik pita valensi dan pita konduksi adalah HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) dan LUMO (**Lowest Unoccupied Molecular Orbital**).

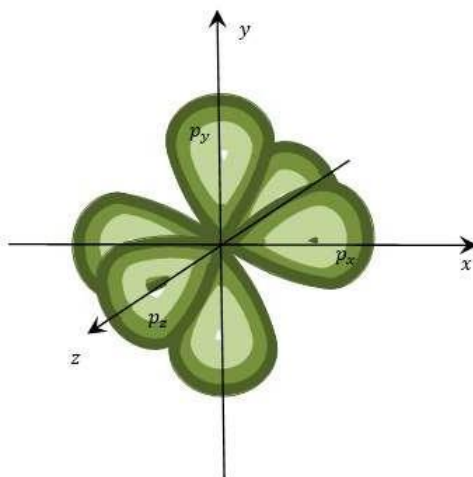
Oleh karena masalah konduktivitas listrik material organik tersebut belum dipahami secara mendalam, maka dalam penelitian ini penulis berusaha mengkaji material organik tersebut secara lebih mendalam. Penelitian ini tidak mengkaji konduktivitas listrik material organik, tetapi membahas fenomena mendasar dari molekul organik tersebut.

2. Metode

Atom-atom yang elektron valensinya berada pada orbit p dapat pula membentuk molekul diatom melalui ikatan – kovalen – oksigen dan

nitrogen, misalnya. Karena orbit atom p memiliki tiga keadaan, maka akan terdapat enam orbit molekul. Hal ini menyebabkan penggolongan orbit molekul menjadi rumit. Walaupun demikian, struktur molekul dari atom-atom yang memiliki elektron p ini dapat kita pahami dengan menggunakan pemodelan dari ketiga orbit atom p . Didalam bagian kajian pustaka adalah modal bagi kita untuk memahami : molekul sekutub (*homopolar molecule*) $p - p$, ikatan terarah (*directed bond*) $s - p$, dan orbit cangkok (*hybrid orbit*) $s - p$.

Dalam kajian tentang Atom Hidrogen (Mekanika Kuantum), kita memecahkan persamaan Schrodinger bagi atom H dan memperlihatkan distribusi probabilitas ruang bagi berbagai fungsi gelombang. Semua pemecahan persamaan Schrodinger bagi atom H_2 tidak berlaku bagi atom-atom lain, namun segi utama geometri tiap orbit atom tetap berlaku. Marilah kita pusatkan perhatian pada ketiga orbit p , yang berkaitan dengan $m_l = -1, 0$, dan $+1$. Distribusi probabilitas yang berkaitan dengan ketiga nilai m_l ini diperlihatkan pada Gambar 3.1. Ketiga ini dapat kita pandang memiliki bentuk geometri “angka delapan” dengan probabilitas terbesar terdapat pada kedua cupingnya. Pada kasus $m_l = 0$, sumbu panjang “angka delapan” ini adalah sepanjang sumbu z , dan probabilitas maksimum dari kedua cupingnya terjadi pada arah $+z$ dan $-z$. Pada kasus $m_l = \pm 1$, “angka delapannya” terletak pada bidang xy , yang kita bayangkan berputar cepat sekali mengelilingi sumbu z , bagi $m_l = +1$, perputarannya adalah searah jarum jam, sedangkan perputaran sebaliknya bagi $m_l = -1$. Disini, probabilitas terbesar pada kedua cupingnya terjadi sepanjang sebuah garis lurus sebarang pada bidang xy . Untuk bahasan selanjutnya, notasi m_l kita ganti dengan notasi berikut yang lebih sederhana. Bagi setiap orbit p , kita tetapkan sebuah label yang menyatakan arah cuping berprobabilitas maksimum. Jadi, p_z adalah orbit dengan probabilitas terbesar menemukan elektron terjadi sepanjang sumbu z , dan begitu pula bagi p_x , dan p_y . Skema ketiga distribusi probabilitas ini diperlihatkan pada Gambar 1. (Jelaslah bahwa orbit p_z berkaitan dengan orbit $m_l = 0$, p_x dan p_y berkaitan dengan campuran $m_l = -1$). Berikut akan kita tinjau berbagai struktur molekul yang mengandung elektron-elektron p dengan menggunakan model sederhana dari ketiga orbit tegak lurus p ini, yakni p_x , p_y dan p_z .



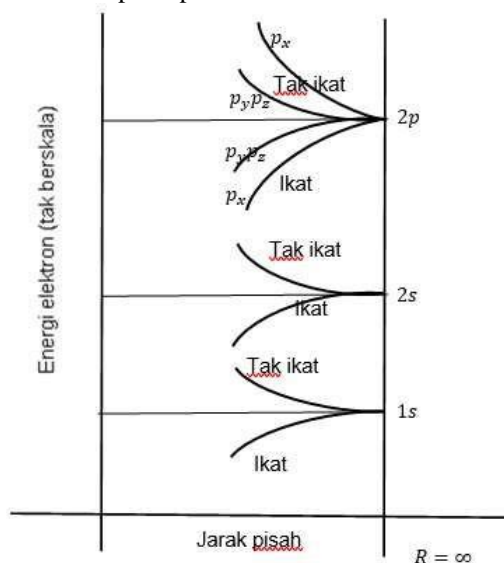
Gambar 1. Distribusi probabilitas ketiga elektron p yang berbeda.

Analisis Geometri Ikatan kovalen $p - p$.

Tinjaulah apa yang terjadi bila dua atom kulit p kita dekatkan dari jarak pisah yang jauh. (Untuk menyederhanakan jumlah kulit atom yang dibahas, tinjaulah saja atom-atom $2p$). Kedua orbit *atom* $1s$ dari masing-masing atom dialihkan menjadi dua orbit molekul $1s$, tepat sama seperti yang dijumpai pada kasus molekul H_2 . Salah satu dari kedua orbit ini adalah orbit ikat, dan yang lainnya orbit takikat. Setiap atom mengisi kulit $1s$, karena setiap orbit molekuler dapat menahan dua elektron, orbit $1s$ ikat dan takikat memenuhi kapasitas. Hal yang sama juga berlaku bagi keadaan $2s$. Kedua tingkat $2s$ dari masing-masing atom juga membentuk orbit ikat dan takikat, karena kulit $2s$ masing-masing atom terisi penuh, maka keempat elektron $2s$ mengisi penuh kedua orbit molekul $2s$. Karena atom-atom yang kita tinjau memiliki kulit p yang terisi sebagian, maka ikatannya sangat bergantung pada orbit-orbit p . Ini, sekali lagi, berperilaku sama seperti pada

setiap orbit s . Bagi setiap orbit atom p (p_x , p_y dan p_z) terdapat orbit molekul ikat dan takikat. Tetapi, orbit p yang terletak sepanjang garis hubung kedua atom, karena lebih bertumpang tindih, akan lebih terpengaruhi. Andaikanlah ini adalah arah x . Pada jarak antaratom terdekat, orbit p_x akan lebih bertumpang tindih daripada orbit p_y atau p_z . Efek yang sama terjadi pula bagi semua orbital molekuler takikat, karena ketumpangtindihan orbital p_x lebih besar, orbital takikat lebih berhasil menurunkan kerapatan probabilitas elektron antara atom-atom. Akibatnya, orbital takikat p_x kurang stabil, jadi energinya lebih tinggi.

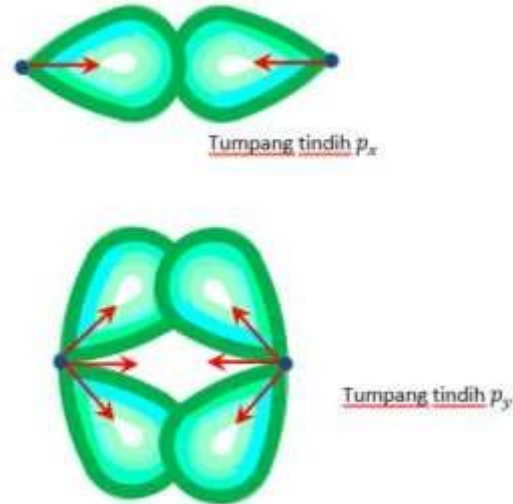
Ketumpangtindihan orbital p_y dan p_z tidaklah sebesar pada orbital p_x , jadi sedikit sekali terpengaruhi. Karena pengaruh kedua atom yang saling menghampiri pada orbital p_y dan p_z , tidak dapat dibedakan, keduanya memiliki energi yang sama. Gambar 2 memperlihatkan orbit $1s$, $2s$, dan $2p$ sebagai fungsi dari jarak antarinti kedua atom.



Gambar 2. Orbital $2p$ ikat dan takikat.

Pada Gambar 3 tampak suatu ilustrasi yang memperlihatkan mengapa orbit ikat p_x lebih stabil daripada orbit ikat p_y dan p_z . Probabilitas elektron pada orbit ikat molekuler p_x mencapai nilai maksimumnya pada arah hubung langsung kedua inti atom, sehingga elektronnya berhasil mengikat

kedua inti tadi. Bagi kasus p_y atau p_z (hanya p_y yang diperlihatkan), maksimum probabilitas elektronnya terjadi diatas dan dibawah sumbu x yang menghasilkan ikatan. Karena resultan gaya tarik ini lebih kecil daripada yang untuk kasus orbital p_x , ikatan molekuleranya kurang stabil.

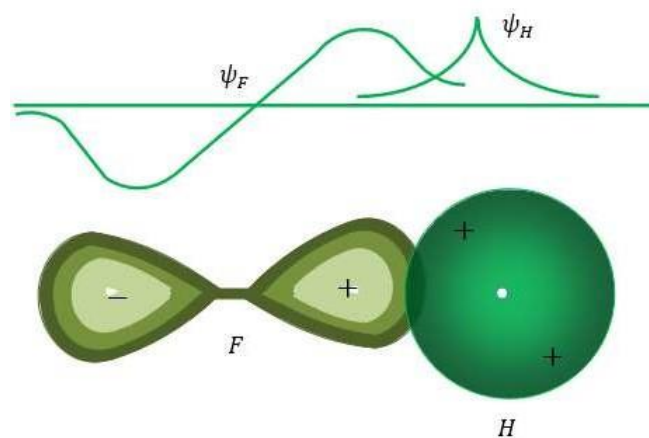


Gambar 3. Gaya ikat dari tumpang-tindih orbit p_x dan p_y . Adanya komponen gaya ikat yang tidak sepanjang sumbu x , menyebabkan gaya ikat resultan bagi orbit p_y lebih lemah

Analisis Geometri Ikatan Molekuler $s - p$.

Seringkali terjadi bahwa suatu molekul stabil dibentuk dari dua atom, yang satu dengan sebuah elektron valensi keadaan s dan yang lainnya dengan satu atau lebih elektron valensi keadaan p , misalnya, molekul HF . Atom F memiliki lima elektron dalam kulit p , sehingga dari ketiga orbital atom $2p$ ini, dua diantaranya masing-masing akan menampung dua elektron, dan yang ketiga hanya menampung satu elektron. Keempat pasangan elektronnya dapat kita abaikan, karena pengaruhnya pada ikatan molekuler tidaklah mencolok, dan memusatkan perhatian pada elektron tunggal p yang tidak berpasangan. Kedua

“cuping” distribusi probabilitas berhubungan dengan dua “cuping” distribusi keadaan p dari fungsi gelombang, dalam mana tanda dari ψ berlawanan bagi masing-masing cuping. Fungsi gelombang $1s$ dari H hanya bertanda tunggal. Jika, sewaktu atom H dan F saling menghampiri dari jarak pisah yang jauh, fungsi gelombang atom H dan F saling menghampiri dari jarak pisah yang jauh, fungsi gelombang atom H ternyata bertanda sama seperti tanda dari cuping fungsi gelombang F yang terdekat, maka probabilitas elektron akan bertambah besar, dan karena itu terbentuk suatu orbital sp ikat. Orbital sp takikat juga berpeluang terbentuk, jika fungsi gelombang atom H dan F berbeda tanda.



Gambar 4. Tumpang tindih dari fungsi gelombang s dan p .

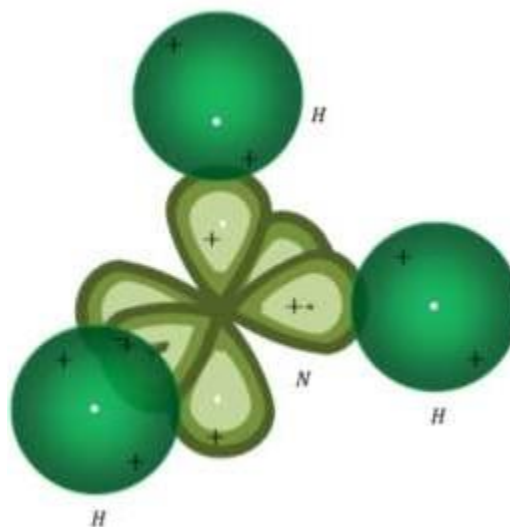
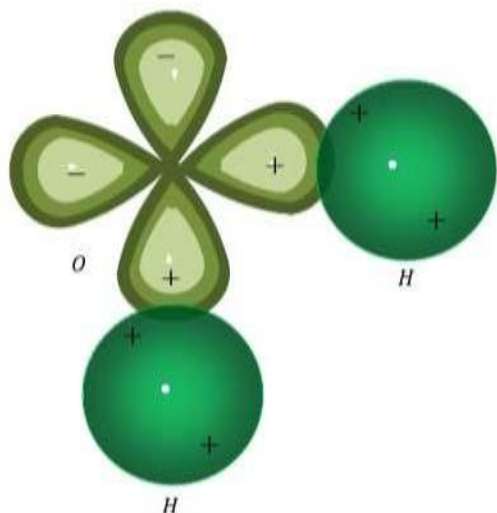
Sekarang tinjaulah molekul air, H_2O . Oksigen memiliki delapan elektron, empat diantaranya

menempati kulit $2p$. Pengisian semua elektron ini pada orbital atomik $2p$ dimulai dengan satu elektron

pada orbital p_x , p_y dan p_z , dan kemudian elektron $2p$ yang keempat harus berpasangan dengan salah satu dari ketiga elektron yang semula. Misalkan ia menempati orbital p_x . Dengan demikian atom oksigen memiliki dua elektron $2p$ yang tidak berpasangan, dan masing-masingnya dapat membentuk ikatan dengan elektron $1s$ dari atom H untuk membentuk sebuah molekul H_2O . Gambar 3.5 memperlihatkan penggambaran distribusi probabilitas yang kita perkirakan bagi sebuah atom oksigen dan sebuah molekul H_2O . Molekul ini memiliki ikatan terarah (directed bonds), yang memiliki arah tetap yang terukur. Sudut yang diperkirakan antara kedua ikatan tersebut adalah 90° . Sudut ini dapat diukur lewat percobaan, misalnya dengan mengukur momen dipol elektrik dari atomnya. Hasil yang diperoleh adalah $104,5^\circ$,

sedikit lebih besar daripada yang kita perkirakan. Perbedaan ini dapat ditafsirkan sebagai tolakan Coulomb dari kedua atom H , yang cenderung memperbesar sudut ikat.

Contoh lainnya, tinjaulah molekul NH_3 (amoniak). Atom nitrogen memiliki $Z = 7$, karena itu ia memiliki tiga elektron p yang tidak berpasangan, masing-masing pada orbital atomik p_x , p_y dan p_z . Tiap elektron ini dapat membentuk ikatan dengan atom H untuk membentuk molekul NH_3 , dan kita memperkirakan menemukan tiga ikatan sp dengan arah ikatan yang saling tegak lurus (Gambar 3.6). Sudut ikat yang diukur adalah $107,3^\circ$, yang sekali lagi memperlihatkan pengaruh tolakan Coulomb antar ketiga atom H .

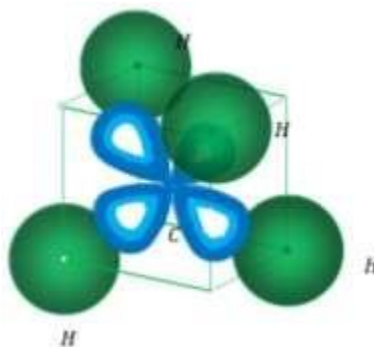


Gambar 5. Tumpang tindih fungsi gelombang elektron dalam H_2O . **Gambar 6.** Tumpang tindih fungsi gelombang elektron dalam NH_3 .

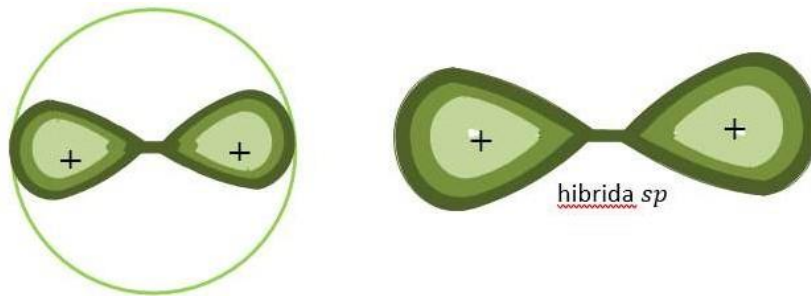
3. Hasil Dan Pembahasan

Dengan menggunakan komputer sebagai panduan dan alat untuk memodelkan dan juga memvisualisasikan struktur ikatan molekular

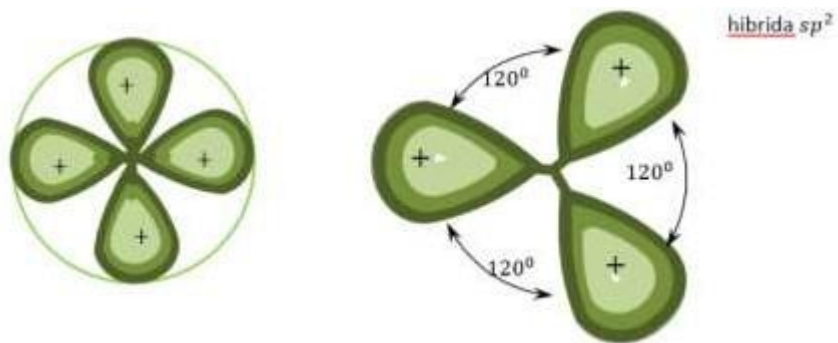
material organik yang didalam hal ini didalam keadaan gas maka didapatkan hasil visualisasi sebagai berikut:



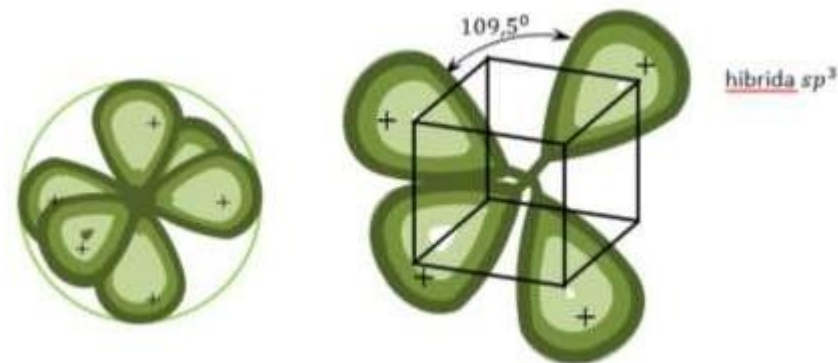
Gambar 7. Susunan ikatan molekular CH_4 .



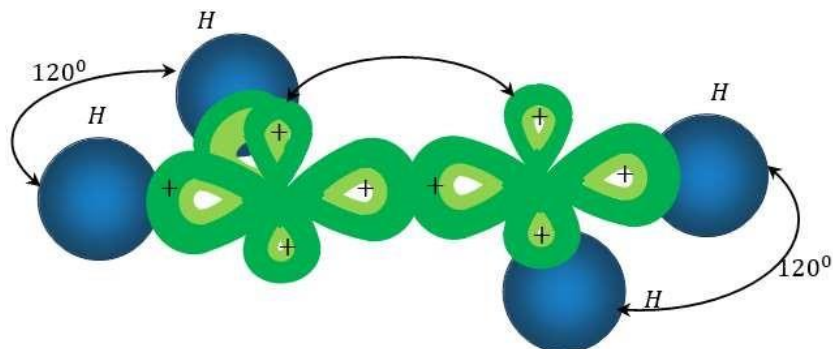
Gambar 8. Distribusi probabilitas pada orbital hibrida sp



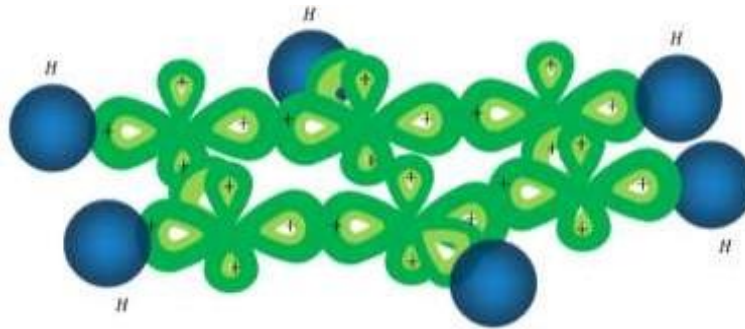
Gambar 9. Distribusi probabilitas pada orbital hibrida sp^2



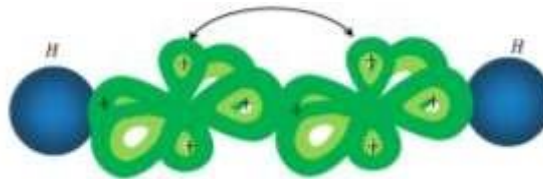
Gambar 10. Distribusi probabilitas pada orbital hibrida sp^3



Gambar 11. Ikatan molekuler dalam C_2H_4 .



Gambar 12. Ikatan molekuler dalam benzena..



Gambar 13. Ikatan molekuler dalam C_2H_2 .

Dari hasil visualisasi dan komputasi pemodelan diatas maka akan dibahaslah struktur molekular organik yang akan disajikan sebagai berikut. Salah satu atom $2p$ yang akan ditinjau didalam Bab ini adalah karbon. Karbon membentuk banyak sekali jenis ikatan molekular yang beragam. Kenyataan inilah yang menghasilkan keberanekaragaman dalam jenis dan kerumitan dan juga yang melandasi pembentukan molekul organik yang beragam.

Sifat-sifat dari berbagai molekul senyawa karbon dijelaskan dengan konsep hibridisasi sp . Karbon dengan enam elektron, memiliki konfigurasi $1s^2 2s^2 2p^2$. Jadi, pada keadaan normal diperlihatkan sifat atom bervalensi 2, dengan kedua elektron $2p$ -nya memberi saham pada struktur molekularnya. Oleh karena itu diperkirakan karbon membentuk struktur stabil seperti CH_2 , dengan ikatan arah sp (seperti pada H_2O) dan sudut ikat kurang lebih 90° . Ternyata, yang terbentuk adalah CH_4 (metan) dalam struktur tetrahedral (Gambar 4.1), dengan empat ikatan setara. Contoh lainnya unsur-unsur pada kolom ketiga daftar berkala (boron, aluminium, galium...) memiliki konfigurasi terluar $ns^2 np$ ($n = 2$ bagi boron, $n = 3$ bagi aluminium, dan seterusnya). Karena itu, diperkirakan unsur-unsur ini membentuk senyawa seolah-olah mereka memiliki satu elektron valensi. Oleh karena itu, kita memperkirakan terbentuk halida seperti BCl atau GaF , oksida seperti B_2O atau Al_2O , nitrida seperti B_3N atau Al_3N , hidrida seperti BH atau GaH , dan seterusnya. Ternyata, boron, aluminium, dan galium pada umumnya berperilaku seolah-olah mereka memiliki tiga elektron valensi, dan membentuk senyawa seperti BCl_3 , Al_2O_3 , AlN , dan B_2H_6 . Ketiga elektron valensi ini, tampaknya setara, tidak ada cara untuk mengaitkan dua elektron

valensinya dengan orbit s dan satu sisanya dengan satu orbit p . Ikatan yang dibuat oleh ketiga elektron ini saling membentuk sudut 120° .

Adalah efek hibridisasi sp yang bertanggung jawab bagi valensi tiga (ketimbang satu) pada boron, dan empat (ketimbang dua) pada karbon. Keempat ikatan pada CH_4 adalah setara dan identik, yang tidak mungkin teramalkan jika kita mempunyai dua ikatan ss dan dua ikatan sp , begitu pula pada BF_3 atau BCl_3 , ketiga ikatannya identik dan jelas tidak dicirikan dengan dua ikatan sp dan satu ikatan pp .

Arti lazim dari hibrida adalah suatu keturunan hasil perkawinan dua induk berbeda, yang sama sekali tidak mirip dengan salah satu dari kedua induknya, tetapi mewarisi beberapa ciri khas mereka. Dalam kasus orbit molekular, penghibridan merujuk ke suatu proses yang dengannya setiap orbital tidak dapat lagi dicirikan sebagai orbital s atau p , melainkan merupakan campuran orbital s dan p . Pembentukan hibrida sp biasanya sebagai berikut:

1. Dalam sebuah atom dengan konfigurasi $2s^2 2p^n$, salah satu elektron $2s$ tereksitasi ke kulit $2p$, yang memberikan konfigurasi $2s^2 p^{n+1}$.
2. Orbital hibrida dibentuk dengan mencampurkan secara seimbang fungsi gelombang yang menyatakan orbital $2s$ dengan setiap orbital $2p$. Sebagai contoh, pada boron, konfigurasi $2s^2 2p$ diubah menjadi $2s^2 2p^2$. Dengan mengandaikan keadaan $2p$ -nya adalah $2p_x$ dan $2p_y$, fungsi gelombang hibrida yang dihasilkan dapat dinyatakan sebagai gabungan dari ψ_{2s} , ψ_{2p_x} , dan ψ_{2p_y} , seperti

$$\psi = \psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y}$$

Gabungan lainnya dapat dibentuk dengan mengurangi masing-masing fungsi gelombang, ketimbang menjumlahkannya.

Ilustrasi distribusi probabilitas yang diperkirakan bagi orbital hibrida sp , sp^2 , dan sp^3 diperlihatkan pada Gambar 8, 9 dan 10. Perlu diingat bahwa ketiga orbital ini belum menyatakan suatu orbital molekuler – mereka adalah semata-mata adalah saham dari salah satu atom pada distribusi elektron terikat dari molekul.

Dengan demikian struktur tetrahedral CH_4 adalah semata-mata hasil dari penyusunan simetris ruang dari keempat orbital hibrida sp^3 dari C , dengan setiap orbital hibrida mengikat satu atom H . Sudut ikat tetrahedron simetris seperti ini adalah $109,5^\circ$, sesuai dengan hasil pengukuran sudut ikat CH_4 dan hibrida sp^3 lainnya, yang diperlihatkan dalam Tabel-tabel yang telah dibuat oleh para Fisikawan dan Kimiawan (tidak disajikan disini).

Yang juga mungkin adalah hanya dua elektron $2p$ dalam konfigurasi $2s2p^3$ dari karbon yang terlibat dalam orbital hibrida, elektron $2p$ yang ketiga tersedia, misalnya, untuk membentuk orbital molekuler $p-p$ biasa. Molekul etilen C_2H_4 adalah contoh struktur ini. Ketiga orbital hibrida sp^2 membentuk sudut ikat 120° , dua dari ketiga orbital hibrida sp milik setiap atom karbon berikatan dengan satu atom H , dan yang ketiga berikatan dengan atom karbon yang lain. Orbital p takterhibridakan juga membentuk suatu ikatan antara dua atom karbon, dengan cara seperti yang diperlihatkan pada Gambar 3.3 bagi orbital molekuler $p-p$ “tidak searah sumbu”. Pada Gambar 11 diperlihatkan susunan ikatan pada C_2H_4 . Ada dua ikatan antara pasangan karbon, satu dari hibrida sp^2 dalam karbon adalah benzena (C_6H_6) dalam mana setiap karbon mengikat satu atom H dan dua atom karbon lainnya melalui hibrida sp^2 , dengan sekali lagi satu orbital p takterhibridakan tersedia untuk mengikat atom karbon lainnya. Struktur dasar benzena berbentuk sebuah cincin atom karbon, seperti diperlihatkan pada Gambar 12, dengan perkiraan sudut ikat antara berbagai orbital hibrida adalah 120° .

Terakhir, karbon dapat pula membentuk hibrida sp , yang menyisakan dua orbital p takterhibridakan. Molekul asetilen (C_2H_2) merupakan salah satu contohnya, dengan dua karbon sekarang berikatan melalui tiga ikatan, satu dari hibrida sp dan dua lainnya dari orbital p takterhibridakan. Susunan ikatan dalam C_2H_2 ini diperlihatkan pada Gambar 13.

Keanekaragaman ikatan dari karbon ini merupakan sumber penyebab keanekaragaman sifat berbagai molekul organik, mulai dari yang sederhana yang kita tinjau disini, hingga ke berbagai molekul organik rumit pembangun unsur hayati. (Dan memang, kegagalan NH_3 memiliki sudut ikat 90° yang diperkirakan, dapat dipandang sebagai akibat pengaruh penghibridaan sp ini ketimbang tolakan Coulomb dari atom-atom H). Hibrida lainnya dapat pula terjadi, seperti $3s-3p$ (pada silikon) dan $4s-4p$ (pada germanium). Pengaruh inilah yang membuat bahan-bahan inilah yang membuat bahan-bahan ini, seperti karbon, memiliki valensi 4 dan susunan ikatan simetris, yang diantaranya berperan bagi kemanfaatan Si dan Ge sebagai bahan semikonduktor.

4. Kesimpulan

Mekanika kuantum adalah Tools yang mampu memprediksi struktur mikroskopis molekuler dengan ketepatan yang akurat. Mulai dari struktur molekul yang sederhana yaitu H_2 sampai dengan yang rumit seperti benzena C_6H_6 . Dengan dibantu oleh eksperimen untuk menghitung momen dipol listrik antar ikatan maka didapatkanlah sudut ikat antar molekul yang mempunyai nilai yang sebanding dengan teori (mekanika kuantum). Pemahaman tentang struktur molekul harus dilandasi dengan suatu operator utama didalam kajian mikroskopis tersebut yaitu fungsi gelombang ψ . Fungsi gelombang ψ tersebut yang membuat para Fisikawan mampu melihat kedalam struktur molekuler. Oleh karena penelitian ini dibatasi oleh zat didalam wujud gas (yang mempunyai struktur yang berbeda jika didalam bentuk padatan) maka fenomena konduktivitas elektrik didalam zat padat organik tidak dibahas.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Singh V.P., Parsarathy B., R.S. Singh, A. Aguilera, J. Anthony, M. Payne, 2006, *Characterization of high-photovoltage CuPc-based solar cell structures*, Solar Energy Materials & Solar Cells 90, 798–812.
- [2] Yakimov A, 2002, *High Photovoltage Multiple-heterojunction Organic Solar Cells Incorporating Interfacial Metallic Structure*, Appl. Phys Lett, 80 (9), p.1667.
- [3] Monestier, Florent. 2007. *Modeling the short-circuit current density of polymer solar cells based on P3HT:PCBM blend*. Solar Energy Materials & Solar Cells 91, 405–410.