

Ikatan Kimia & Struktur

Bab 7

Outcomes:

- Menjelaskan faktor-faktor yang mempengaruhi *biocompatibility* material dan kaitannya dengan ikatan kimia
- Menjelaskan pembentukan kation logam dan anion non-logam berdasarkan konfigurasi elektronnya
- Menghitung perubahan energi pada pembentukan ikatan ion
- Mendefinisikan keelektronegatifan dan nilainya berdasarkan posisi unsur pada tabel periodic
- Menentukan ikatan polar, non-polar dan ionic berdasarkan perbedaan keelektronegatifan

Outcomes:

- Menentukan muatan formal untuk molekul atau ion
- Menuliskan struktur elektron Lewis untuk molekul atau ion
- Menjelaskan terjadinya ikatan kimia dengan model tumpeng tindih (*overlapping*) orbital atom dan keterbatasan model tersebut.
- Mengidentifikasi ikatan sigma dan pi dalam suatu molekul

Material untuk *Biomedical Engineering*

- Bahan yang digunakan sebagai pengganti jaringan tubuh yang rusak harus memenuhi sifat-sifat:
 - Sifat fisik yang mirip dengan bahan biologis yang digantikan
 - **Biocompatibility:** kemampuan bahan untuk berantaraksi dengan tubuh manusia tanpa menimbulkan reaksi (immune response)
 - Kekuatan (Strength)
 - Ketahanan (Durability)
 - Polaritas

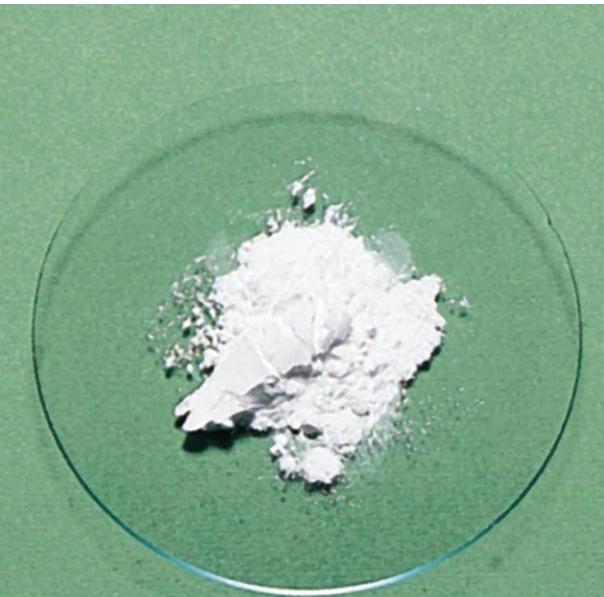
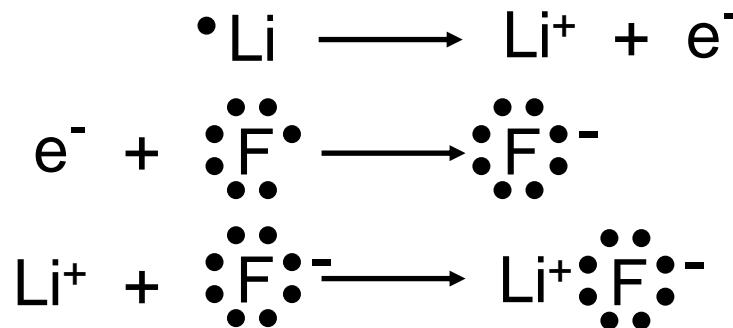
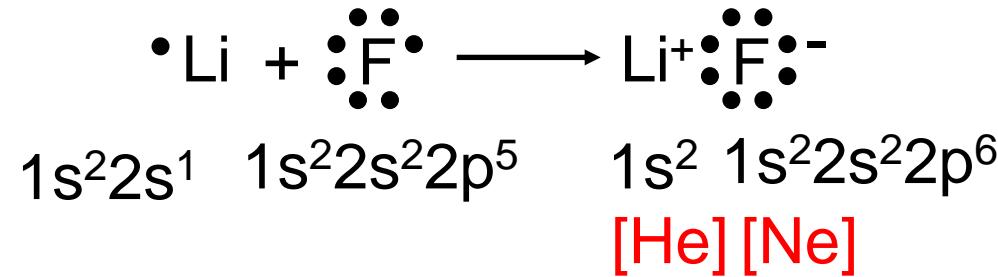
Elektron valensi adalah elektron yang berada di kulit terluar atom. Elektron valensi terlibat dalam ikatan kimia.

| <u>Golongan</u> | <u>Konfigurasi e⁻</u> | <u># e⁻ valensi</u> |
|-----------------|----------------------------------|--------------------------------|
| 1A | ns ¹ | 1 |
| 2A | ns ² | 2 |
| 3A | ns ² np ¹ | 3 |
| 4A | ns ² np ² | 4 |
| 5A | ns ² np ³ | 5 |
| 6A | ns ² np ⁴ | 6 |
| 7A | ns ² np ⁵ | 7 |

Lambang titik Lewis (*Dot Symbols*) untuk beberapa unsur dan gas mulia

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---------|------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---|----|----------|----------|------|------|------|------|------|------|-----|----------|
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1 1A | •H | 2 2A | | | | | | | | | | | | | | | | | 18 8A |
| •Li | •Be• | | | | | | | | | | | | | | | | | He: | |
| •Na | •Mg• | 3 3B | 4 4B | 5 5B | 6 6B | 7 7B | 8 8B | 9 | 10 | 11 1B | 12 2B | •B• | •C• | •N• | •O• | •F• | •Ne• | | |
| •K | •Ca• | | | | | | | | | | | •Al• | •Si• | •P• | •S• | •Cl• | •Ar• | | |
| •Rb | •Sr• | | | | | | | | | | | •Ga• | •Ge• | •As• | •Se• | •Br• | •Kr• | | |
| •Cs | •Ba• | | | | | | | | | | | •In• | •Sn• | •Sb• | •Te• | •I• | •Xe• | | |
| •Fr | •Ra• | | | | | | | | | | | •Tl• | •Pb• | •Bi• | •Po• | •At• | •Rn• | | |

Ikatan Ionik



Pembentukan kation

- Logam membentuk kation dan non-logam membentuk anion
- Umumnya kation berada pada blok *s* atau *p* dengan konfigurasi np^6
- Unsur transisi mempunyai orbital *d* yang belum terisi penuh, tetapi ionisasi dimulai dengan kehilangan elektron dari orbital *s*
- $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$ konfigurasi elektron pada orbital *d* $\frac{1}{2}$ penuh

Potensial Ionisasi (Energi Ionisasi)

| Z | Element | IE ₁ | IE ₂ | IE ₃ | IE ₄ |
|----|---------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 10 | Ne | 2081 | 3952 | 6122 | 9370 |
| 11 | Na | 495.6 | 4562 | 6912 | 9544 |
| 12 | Mg | 737.7 | 1451 | 7733 | 10,540 |
| 13 | Al | 577.6 | 1817 | 2745 | 11,578 |
| 14 | Si | 786.4 | 1577 | 3232 | 4356 |
| 15 | P | 1012 | 1908 | 2912 | 4957 |
| 16 | S | 999.6 | 2251 | 3357 | 4564 |
| 17 | Cl | 1251 | 2297 | 3822 | 5158 |
| 18 | Ar | 1520 | 2666 | 3931 | 5771 |

EI dalam kJ/mol untuk unsur Z = 10 - 18

Pembentukan anion

- Non-logam mempunyai afinitas electron negatif dan membentuk anion dengan konfigurasi elektron np^6
 - Jumlah energi yang dilepaskan untuk menjadi ion negative makin besar dari kiri ke kanan
 - Pembentukan ion yang terisolasi tidak membentuk ikatan ion
- Pembentukan ikatan ion antara logam dan non-logam memerlukan energi

Energi Kisi (energi elektrostatik)

Energi kisi (E) adalah energi yang diperlukan untuk memisahkan secara sempurna 1 mol senyawa ionik (fasa padat) menjadi ion-ionnya dalam fasa gas.

$$V = k \frac{q_1 q_2}{r}$$

q_1 adalah muatan kation

q_2 adalah muatan anion

r adalah jarak antar ion

$$k = 1.389 \times 10^5 \text{ kJ pm/mol}$$

$$F \propto \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

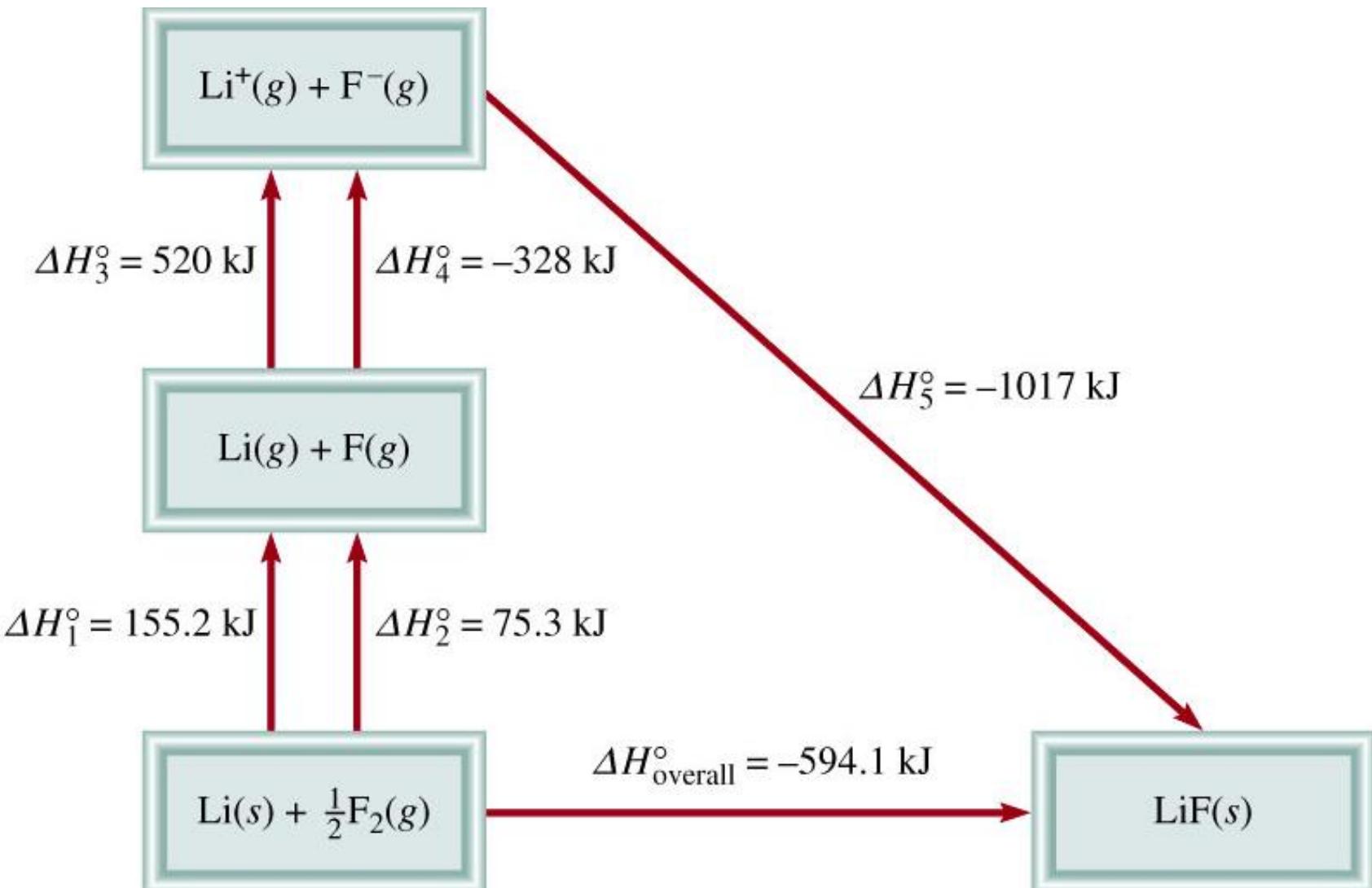
Energi kisi(E) naik bila q naik
dan/atau r turun.

| <u>senyawa</u> | <u>energi kisi</u> | |
|------------------|--------------------|------------------|
| MgF ₂ | 2957 | q= +2,-1 |
| MgO | 3938 | q= +2,-2 |
| LiF | 1036 | $r F^- < r Cl^-$ |
| LiCl | 853 | |

Energi ikatan ion

- Contoh: pembentukan NaF
- Energi ionisasi Na = 496 kJ/mol
- Afinitas elektron F = -328 kJ/mol
- **Energi ikatan ion = +496 kJ/mol – 328 kJ/mol = +168 kJ/mol**

Siklus Born-Haber untuk penentuan Energi kisi



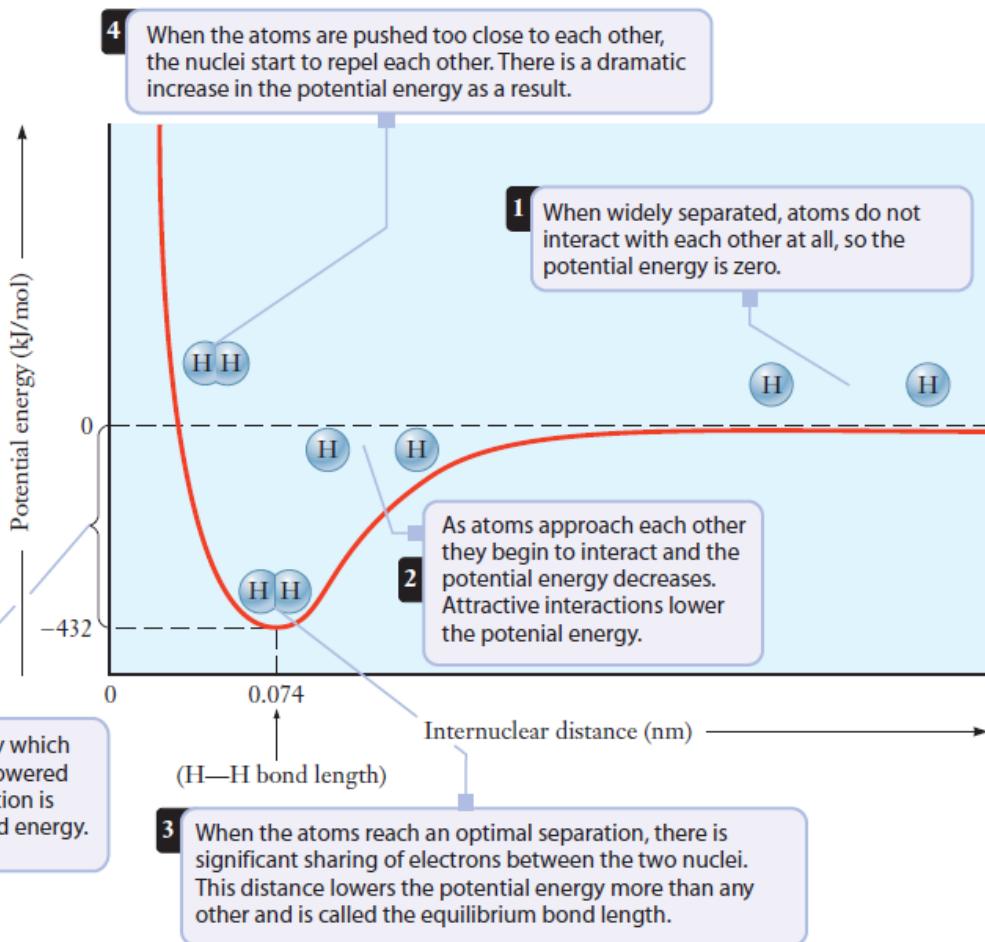
$$\Delta H_{\text{overall}}^\circ = \Delta H_1^\circ + \Delta H_2^\circ + \Delta H_3^\circ + \Delta H_4^\circ + \Delta H_5^\circ$$

TABLE 9.1**Lattice Energies and Melting Points of Some Alkali Metal and Alkaline Earth Metal Halides and Oxides**

| Compound | Lattice Energy (kJ/mol) | Melting Point (°C) |
|-------------------|-------------------------|--------------------|
| LiF | 1017 | 845 |
| LiCl | 828 | 610 |
| LiBr | 787 | 550 |
| LiI | 732 | 450 |
| NaCl | 788 | 801 |
| NaBr | 736 | 750 |
| NaI | 686 | 662 |
| KCl | 699 | 772 |
| KBr | 689 | 735 |
| KI | 632 | 680 |
| MgCl ₂ | 2527 | 714 |
| Na ₂ O | 2570 | Sub* |
| MgO | 3890 | 2800 |

*Na₂O sublimes at 1275°C.

Ikatan kimia & energi



Ikatan kovalen terbentuk bila gaya tolak-menolak dan tarik-menarik seimbang dan nilai energi minimum. →

***energi ikatan**

***panjang ikatan**

Energi ikatan adalah perubahan entalpi yang diperlukan untuk memutuskan ikatan tertentu di dalam 1 mol molekul dalam fasa gas.

Energi ikatan



Energi Ikatan

Ikatan tunggal < ikatan rangkap 2 < ikatan rangkap 3

TABLE 9.4**Some Bond Enthalpies of Diatomic Molecules* and Average Bond Enthalpies for Bonds in Polyatomic Molecules**

| Bond | Bond Enthalpy (kJ/mol) | Bond | Bond Enthalpy (kJ/mol) |
|------------------|---------------------------|-------|---------------------------|
| H—H | 436.4 | C—S | 255 |
| H—N | 393 | C=S | 477 |
| H—O | 460 | N—N | 193 |
| H—S | 368 | N=N | 418 |
| H—P | 326 | N≡N | 941.4 |
| H—F | 568.2 | N—O | 176 |
| H—Cl | 431.9 | N=O | 607 |
| H—Br | 366.1 | O—O | 142 |
| H—I | 298.3 | O=O | 498.7 |
| C—H | 414 | O—P | 502 |
| C—C | 347 | O=S | 469 |
| C=C | 620 | P—P | 197 |
| C≡C | 812 | P=P | 489 |
| C—N | 276 | S—S | 268 |
| C=N | 615 | S=S | 352 |
| C≡N | 891 | F—F | 156.9 |
| C—O | 351 | Cl—Cl | 242.7 |
| C=O ⁺ | 745 | Br—Br | 192.5 |
| C—P | 263 | I—I | 151.0 |

Ikatan kimia dan struktur molekul

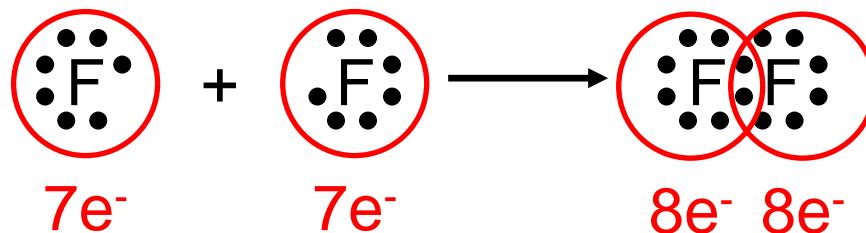
- **Lambang titik Lewis** menggambarkan electron valensi, umumnya untuk unsur-unsur golongan utama → meramalkan ikatan dalam molekul

Contoh:

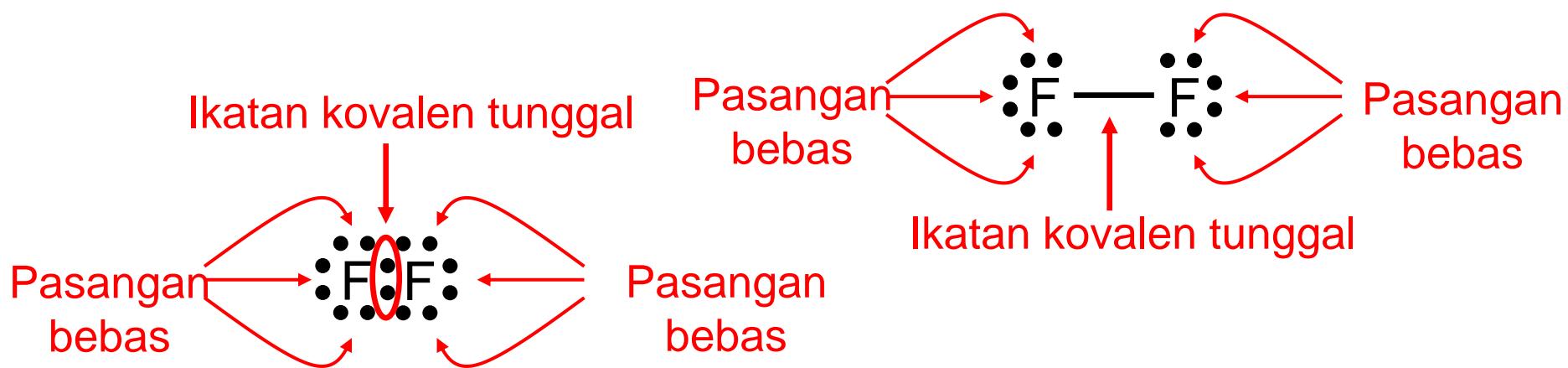


Ikatan kovalen adalah ikatan kimia dimana dua/lebih elektron dipakai bersama oleh dua atom

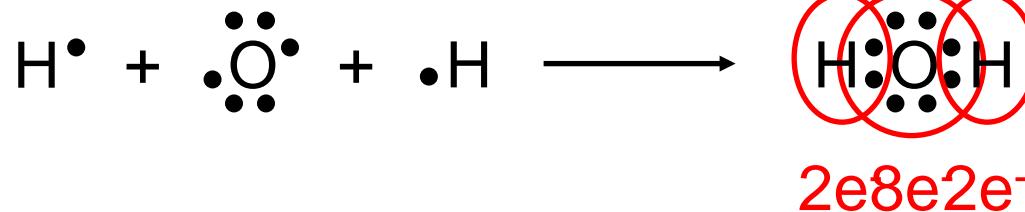
Mengapa dua atom memakai elektron secara bersama?



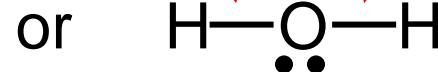
Struktur Lewis F_2



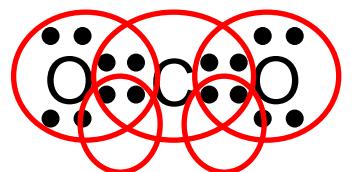
Struktur Lewis air



Ikatan kovalen tunggal



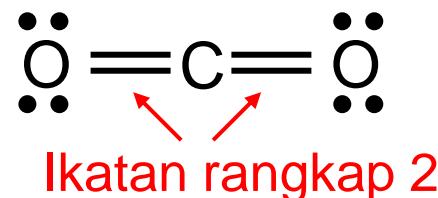
Ikatan rangkap 2 – dua atom berbagi dua pasangan elektron



8e⁻8e⁻8e⁻

Ikatan rangkap 2

atau



Ikatan rangkap 3 – dua atom berbagi tiga pasang elektron



8e⁻8e⁻

Ikatan rangkap 3

atau



↑

Ikatan rangkap 3

Panjang ikatan kovalen

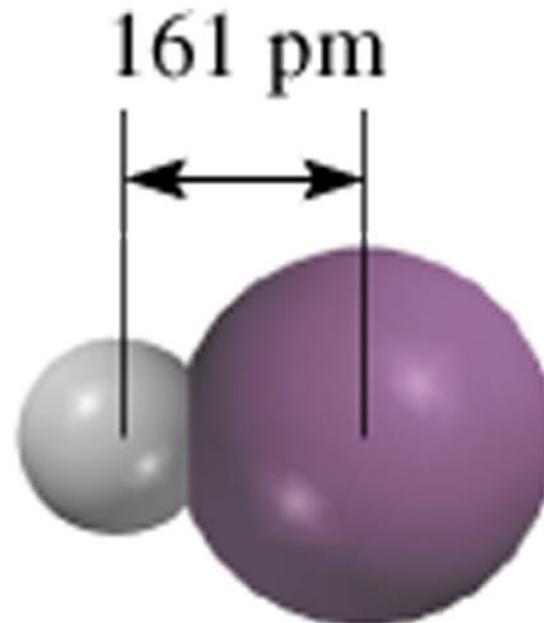
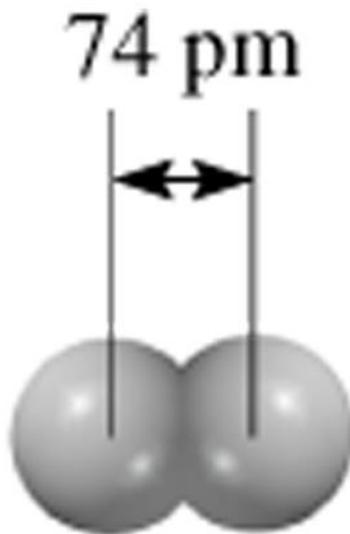


TABLE 9.2

Average Bond Lengths of Some Common Single, Double, and Triple Bonds

| Bond Type | Bond Length (pm) |
|-----------|------------------|
| C—H | 107 |
| C—O | 143 |
| C=O | 121 |
| C—C | 154 |
| C=C | 133 |
| C≡C | 120 |
| C—N | 143 |
| C=N | 138 |
| C≡N | 116 |
| N—O | 136 |
| N=O | 122 |
| O—H | 96 |

Panjang ikatan

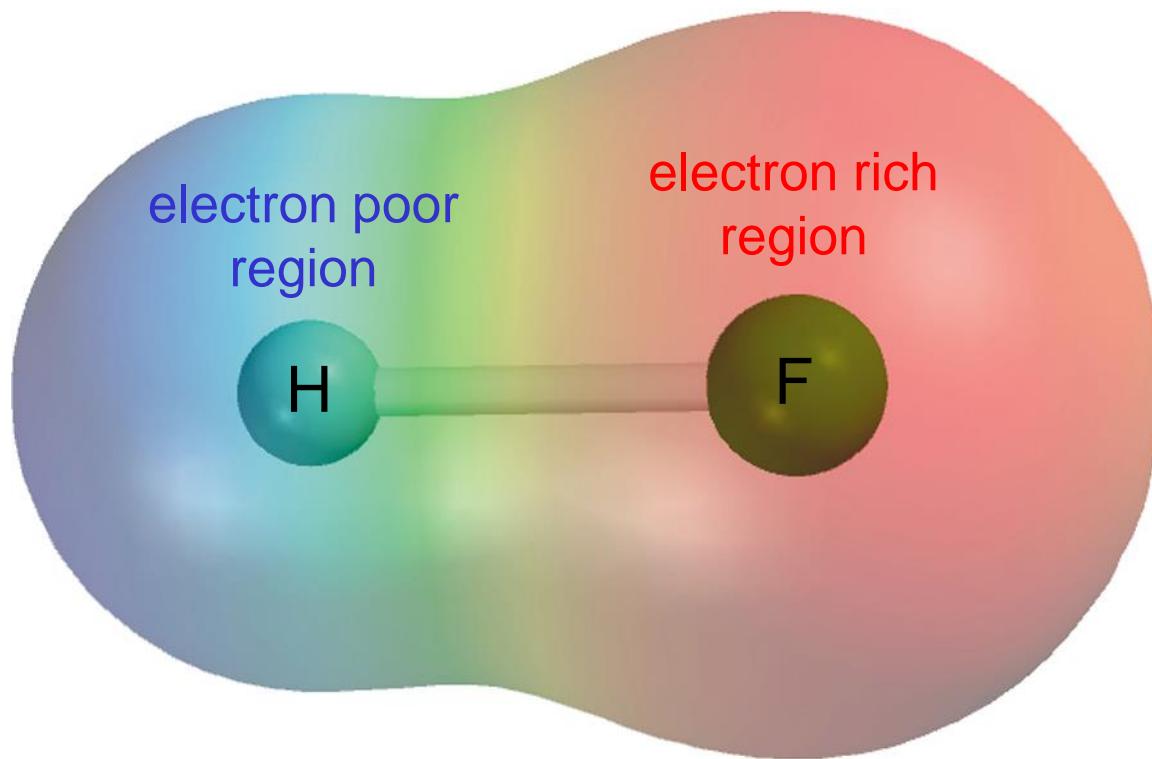
Ikatan rangkap 3 < Ikatan rangkap 2 < Ikatan tunggal

TABLE 9.3**Comparison of Some General Properties of an Ionic Compound and a Covalent Compound**

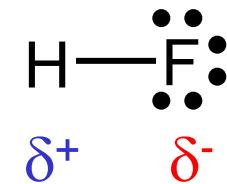
| Property | NaCl | CCl ₄ |
|--------------------------------------|-------------|------------------|
| Appearance | White solid | Colorless liquid |
| Melting point (°C) | 801 | -23 |
| Molar heat of fusion* (kJ/mol) | 30.2 | 2.5 |
| Boiling point (°C) | 1413 | 76.5 |
| Molar heat of vaporization* (kJ/mol) | 600 | 30 |
| Density (g/cm ³) | 2.17 | 1.59 |
| Solubility in water | High | Very low |
| Electrical conductivity | | |
| Solid | Poor | Poor |
| Liquid | Good | Poor |

*Molar heat of fusion and molar heat of vaporization are the amounts of heat needed to melt 1 mole of the solid and to vaporize 1 mole of the liquid, respectively.

Ikatan kovalen polar atau **ikatan polar** adalah ikatan kovalen yang mempunyai kerapatan elektron yang lebih besar di sekitar salah satu atom

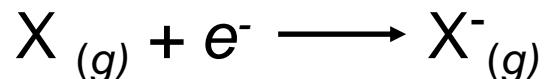


miskin e⁻ kaya e⁻

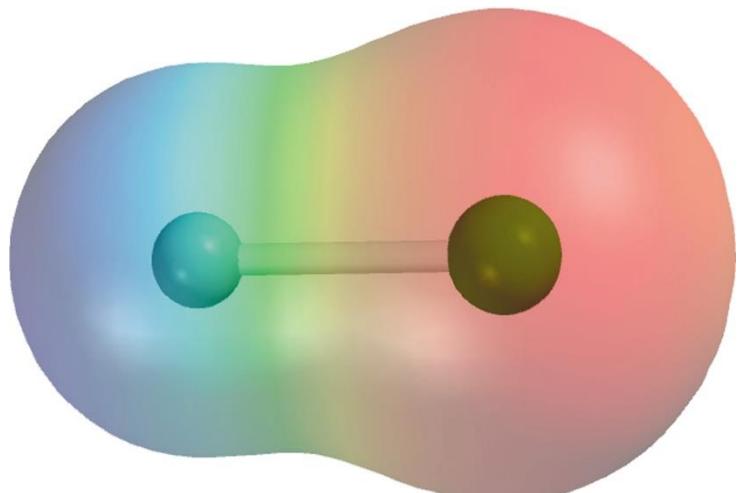


Kelektronegatifan adalah kemampuan suatu atom untuk menarik elektron dalam suatu ikatan kimia.

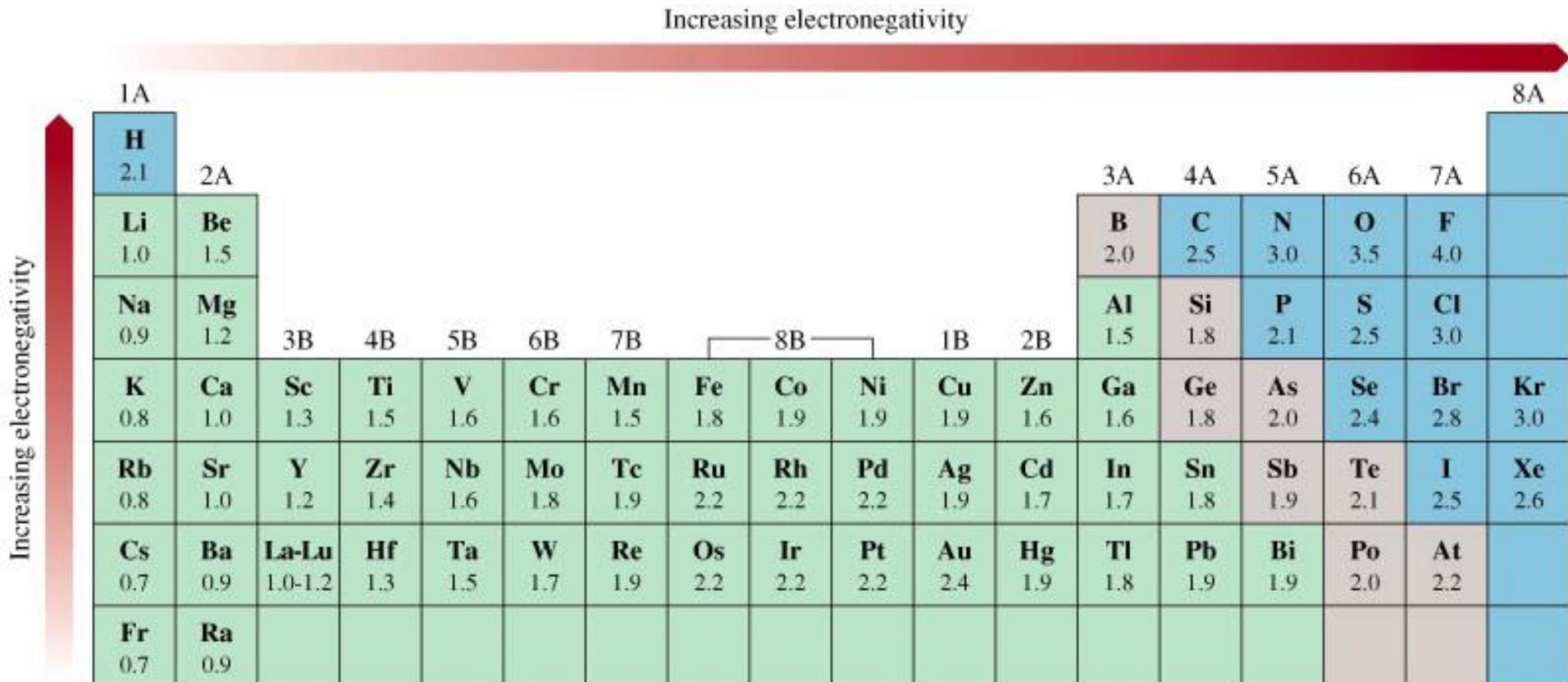
Afinitas elektron – **dapat diukur**, Cl mempunyai nilai tertinggi



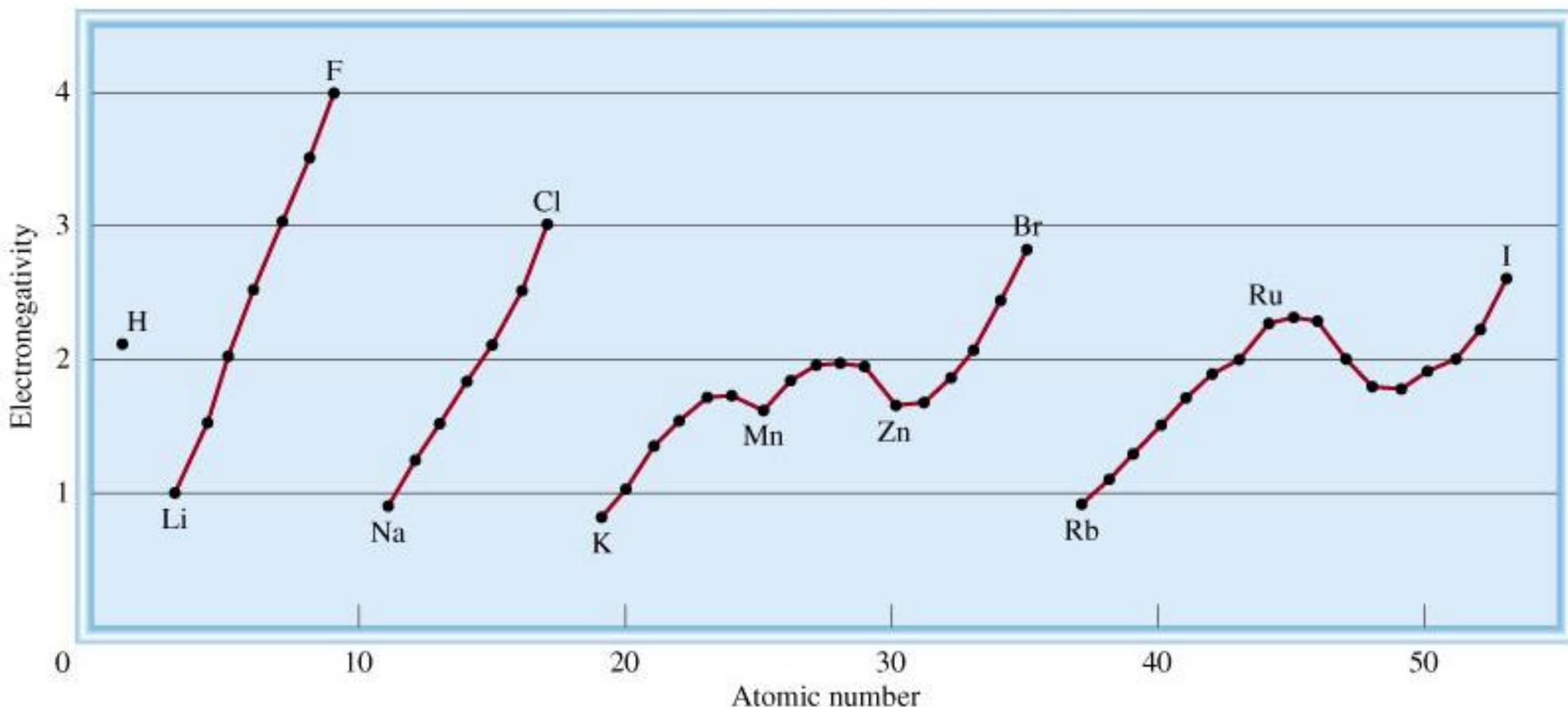
Keelektronegatifan - **relatif**, F paling tinggi



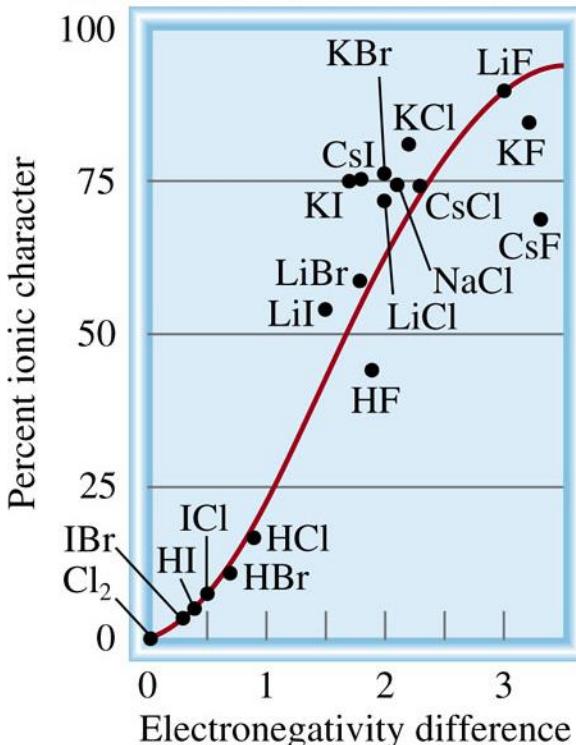
Keelektronegatifan unsur



Variasi keelektronegatifan unsur berdasarkan Nomer Atom



Klasifikasi ikatan berdasarkan perbedaan keelektronegatifan



Perbedaan

0

≥ 2

0 < dan < 2

Jenis ikatan

kovalen

ionik

kovalen polar

Kenaikan perbedaan keelektronegatifan

kovalen

berbagi e⁻

kovalen polar

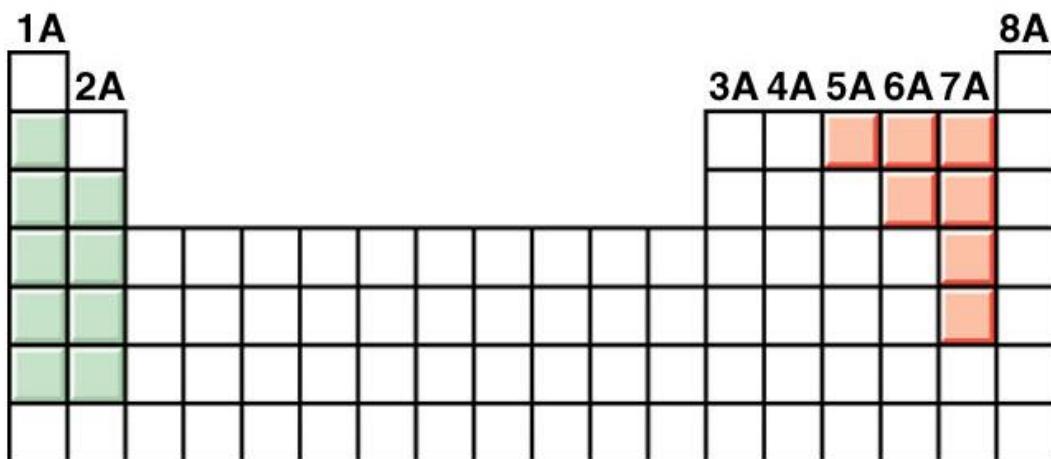
transfer sebagian e⁻

ionik

transfer e⁻

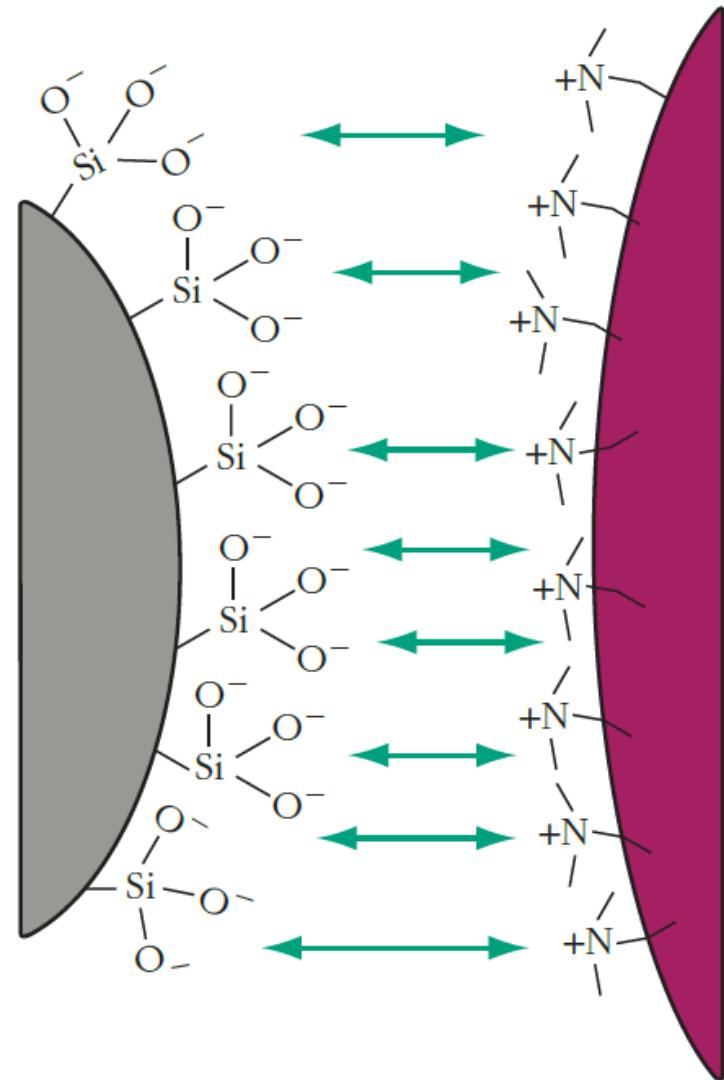
Klasifikasi ikatan-ikatan di bawah ini sebagai ionik, kovalen polar, atau kovalen: ikatan di dalam CsCl; ikatan dalam H₂S; dan ikatan NN dalam H₂NNH₂.

| | | | |
|----------|----------|-------------------|---------------|
| Cs – 0,7 | Cl – 3,0 | $3,0 - 0,7 = 2,3$ | ionik |
| H – 2,1 | S – 2,5 | $2,5 - 2,1 = 0,4$ | kovalen polar |
| N – 3,0 | N – 3,0 | $3,0 - 3,0 = 0$ | kovalen |



Kepolaran ikatan

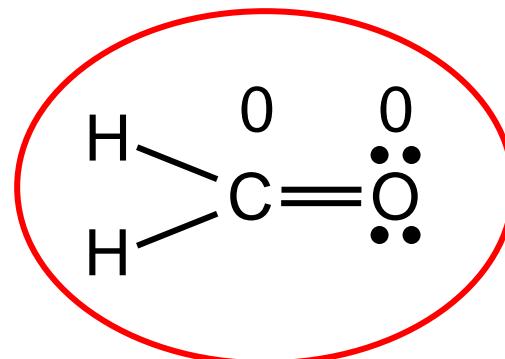
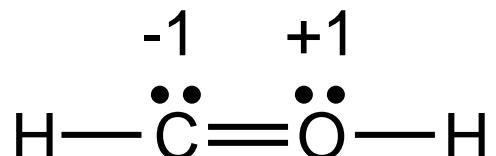
- Kepolaran ikatan penting untuk *biocompatibility*
 - Permukaan sel dapat membentuk ikatan polar dengan air
 - Silika amorf dan berinteraksi kuat dengan permukaan sel seperti sel darah merah dan merusakkannya



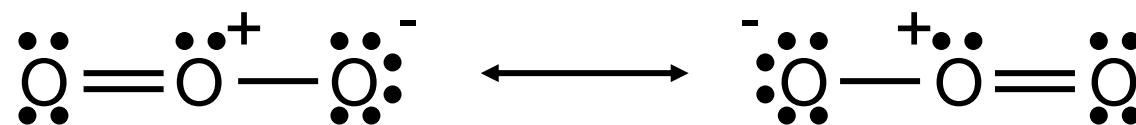
Muatan formal & struktur Lewis

1. Untuk molekul netral, struktur Lewis dengan muatan formal = 0 lebih disukai daripada struktur Lewis dengan muatan formal ≠ 0.
2. Struktur Lewis dengan muatan formal kecil lebih disukai daripada yang muatan formalnya besar.
3. Bila distribusi muatan formal sama, struktur yang lebih disukai adalah struktur dengan muatan formal negatif berada pada atom yang lebih elektronegatif.

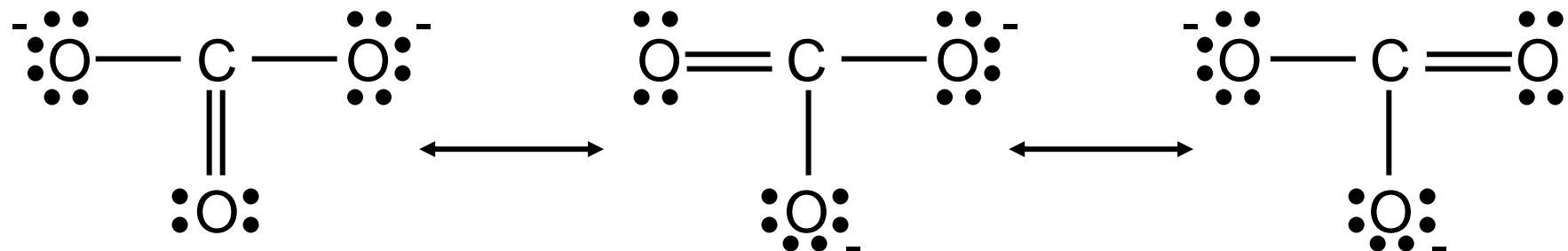
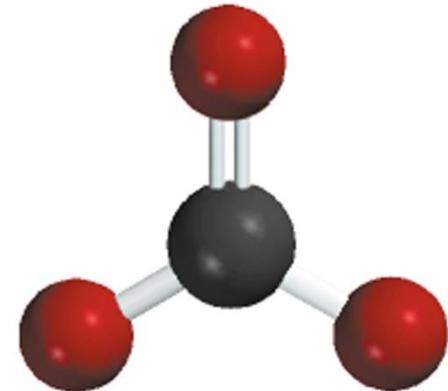
Struktur Lewis mana yang lebih disukai untuk CH₂O?



Struktur resonansi adalah struktur Lewis suatu molekul yang tidak dapat digambarkan secara tepat oleh hanya satu struktur Lewis.

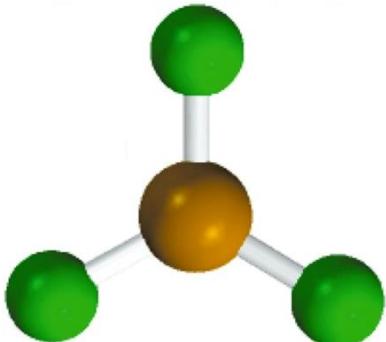
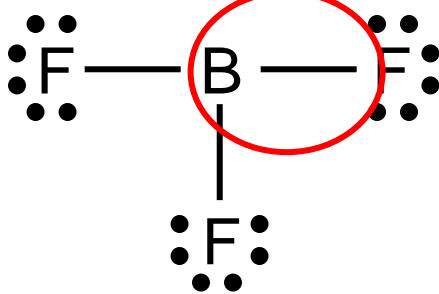
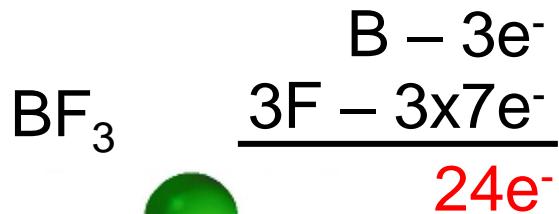
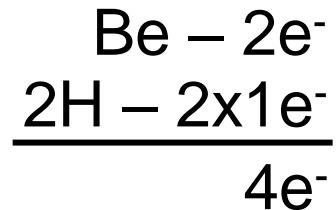
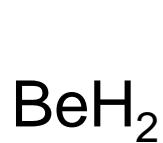


Gambarkan struktur resonansi dari ion karbonat (CO_3^{2-}) !



Perkecualian dari aturan Oktet

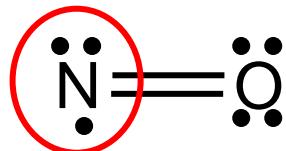
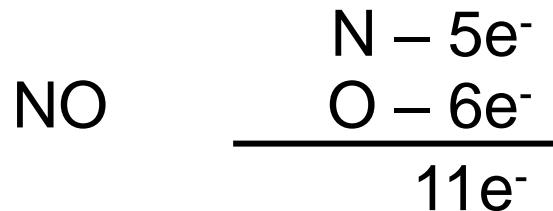
Oktet yang tidak lengkap



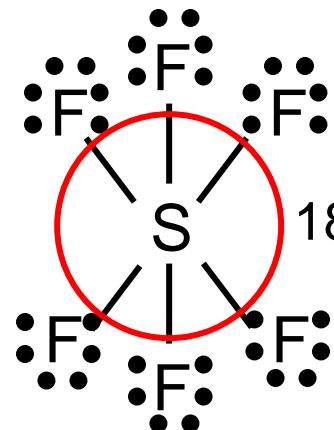
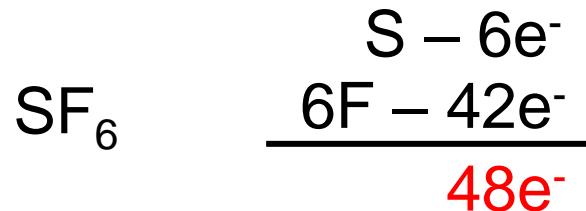
3 ikatan tunggal (3×2) = 6
9 pasangan e- bebas (9×2) = 18
Total = 24

Perkecualian dari aturan Oktet

Molekul dengan jumlah elektron ganjil



Oktet terekspansi (untuk atom pusat dengan $n > 2$)



$$\begin{array}{r} 6 \text{ ikatan tunggal } (6 \times 2) = 12 \\ 18 \text{ pasangan e- bebas } (18 \times 2) = 36 \\ \hline \text{Total} = 48 \end{array}$$

Cara menuliskan struktur Lewis

1. Gambarkan struktur kerangka senyawa yang menunjukkan atom-atom yang saling berikatan. Letakkan unsur yang **paling kurang elektronegatif** di pusat.
2. Hitung jumlah e⁻ valensi. Tambahkan 1 untuk tiap muatan negatif. Kurangi 1 untuk tiap muatan positif.
3. Lengkapi struktur oktet untuk semua atom **kecuali hidrogen**
4. Bila struktur mengandung terlalu banyak elektron, buat ikatan rangkap 2 atau 3 pada atom pusat sesuai dengan jumlah e⁻ tersisa.

Tuliskan struktur Lewis dari nitrogen trifluorida (NF_3).

Langkah 1 – N kurang elektronegatif dari F, letakkan N di pusat

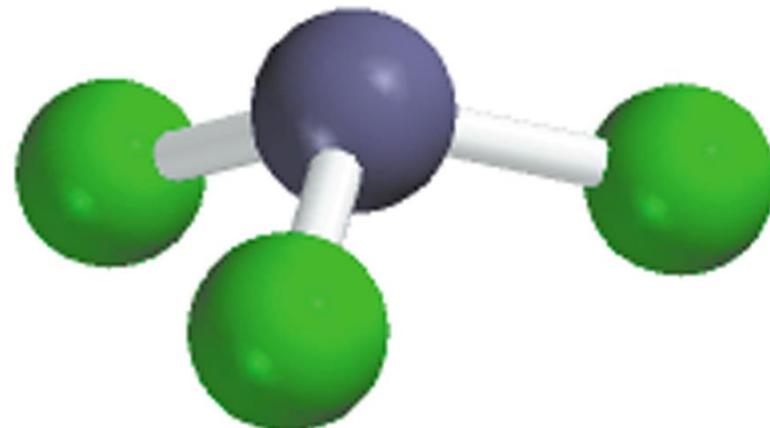
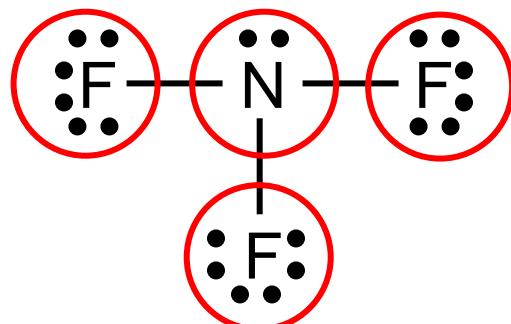
Langkah 2 – Hitung elektron valensi N - 5 ($2s^22p^3$) dan F - 7 ($2s^22p^5$)

$$5 + (3 \times 7) = \text{26 elektron valensi}$$

Langkah 3 – Gambar ikatan tunggal antara atom N dan F dan lengkapi oktet pada atom N dan F.

Langkah 4 - Periksa apakah # e^- dalam struktur = jumlah e^- valensi

$$3 \text{ ikatan tunggal } (3 \times 2) + 10 \text{ pasangan elektron } (10 \times 2) = \text{26 elektron valensi}$$



Tuliskan struktur Lewis ion karbonat (CO_3^{2-}).

Langkah 1 – C kurang elektronegatif dari O, letakkan C di pusat

Langkah 2 – Hitung elektron valensi C - 4 ($2s^22p^2$) dan O - 6 ($2s^22p^4$) + muatan – 2

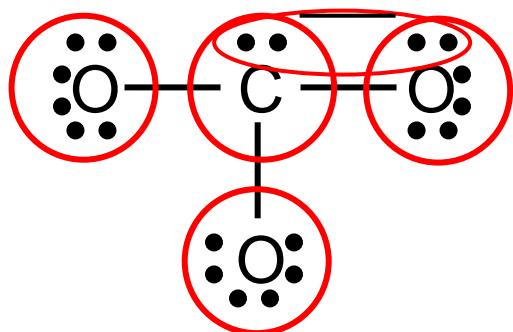
$$4 + (3 \times 6) + 2 = \text{24 elektron valensi}$$

Langkah 3 – Gambarkan ikatan tunggal antara atom C dan O & lengkapi oktet pada atom C dan O.

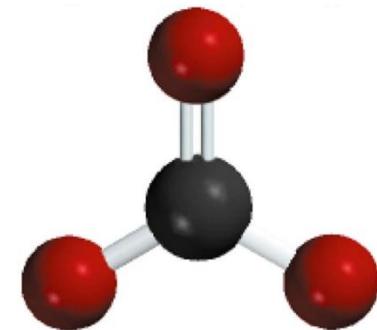
Langkah 4 - Periksa apakah # e⁻ dalam struktur sama dengan jumlah e⁻ valensi

$$3 \text{ ikatan tunggal} (3 \times 2) + 10 \text{ pasangan elektron} (10 \times 2) = \text{26 e}^- \text{ valensi}$$

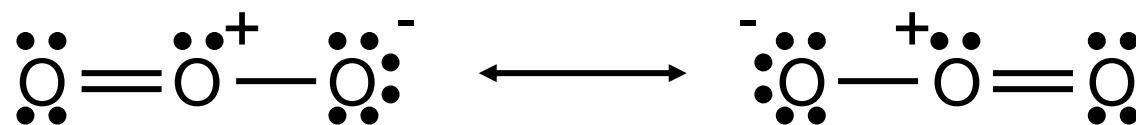
Langkah 5 - Terlalu banyak elektron, bentuk ik. rangkap 2 & periksa # e⁻



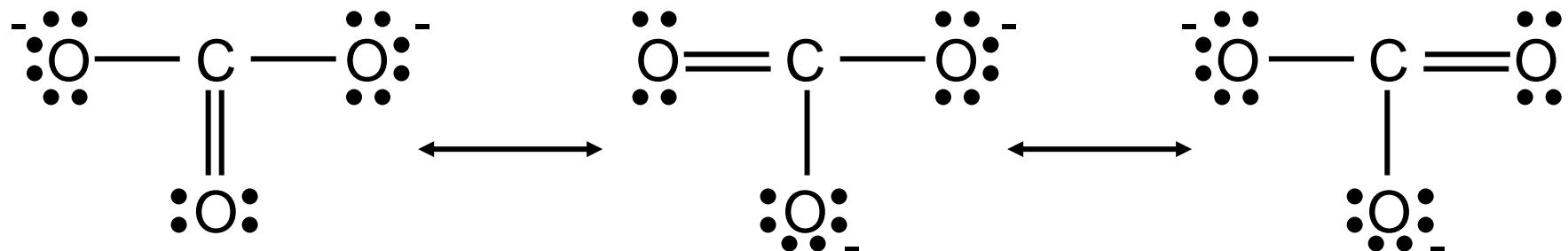
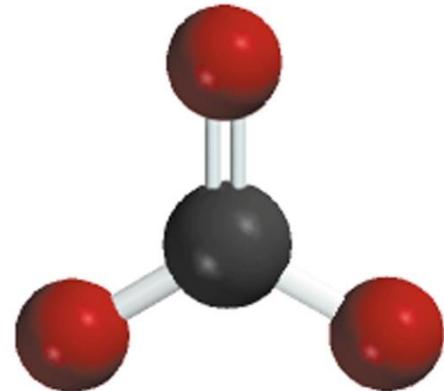
$$\begin{array}{rcl} 2 \text{ ikatan tunggal} (2 \times 2) & = & 4 \\ 1 \text{ ikatan rangkap 2} & = & 4 \\ \hline 8 \text{ pasangan e- bebas} (8 \times 2) & = & 16 \\ \hline \text{Total} & = & 24 \end{array}$$



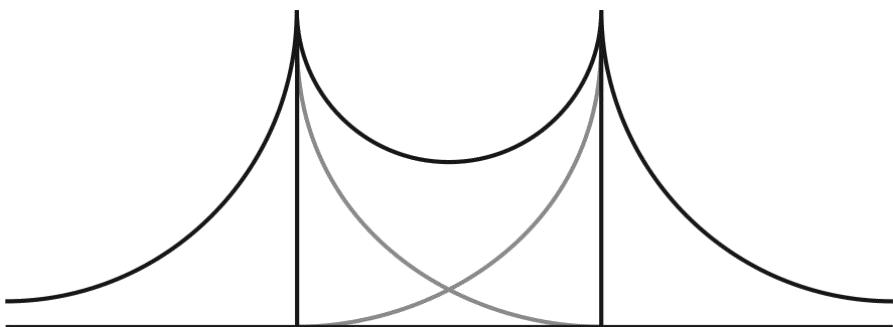
Struktur resonansi adalah struktur Lewis suatu molekul yang tidak dapat digambarkan secara tepat oleh hanya satu struktur Lewis.



Gambarkan struktur resonansi dari ion karbonat (CO_3^{2-})

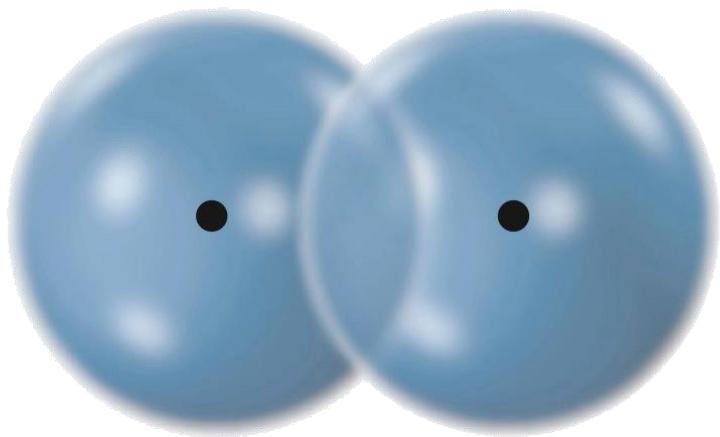


Overlap orbital dan ikatan kimia



Fungsi gelombang orbital 1s

Pada molekul H_2 terjadi overlap antar orbital 1s membentuk ikatan kovalen

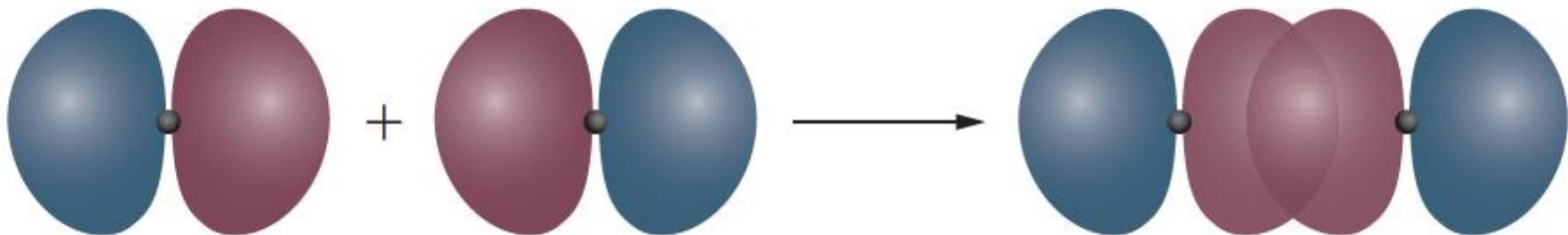


Kerapatan elektron dalam molekul H_2

- Untuk N_2 , struktur Lewis menunjukkan ada 6 elektron yang dipakai bersama

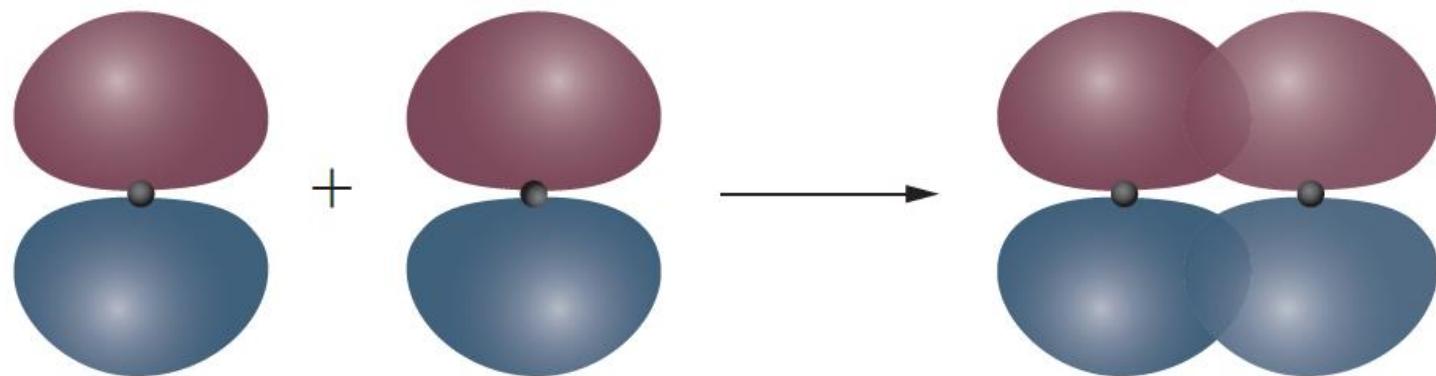


- Tiap atom N mempunyai 1 elektron valensi pada tiap orbital $2p$
- Orbital $2p$ dapat overlap pada berbagai orientasi
- Suatu orbital $2p$ orbital dari 1 atom N overlap dengan orbital $2p$ dari atom N yang kedua membentuk ikatan **sigma (σ)**.
- **Ikatan sigma** merupakan interferensi konstruktif untuk *end-to-end overlap*, di mana kerapatan elektron berada pada garis hubung antara kedua atom.



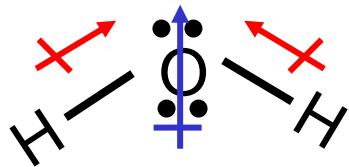
- Pembentukan ikatan sigma akibat *end-to-end overlap* dua orbital *p*
 - Dua orbital *p* saling mendekat mengikuti sumbu *x*, *y*, atau *z*

- Dua orbital $2p$ lainnya pada tiap atom N *overlap side-to-side* membentuk ikatan pi (π)
 - **Ikatan pi** merupakan interferensi konstruktif untuk *side-to-side overlap*, di mana kerapatan elektron berada di atas dan di bawah atau di depan dan dibelakang garis hubung antara kedua atom

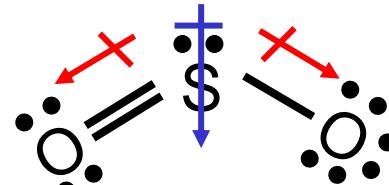


Molekul mana yang mempunyai momen dipol?

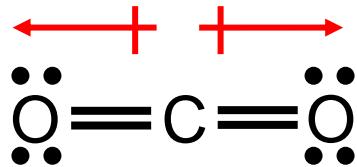
H_2O , CO_2 , SO_2 , atau CH_4



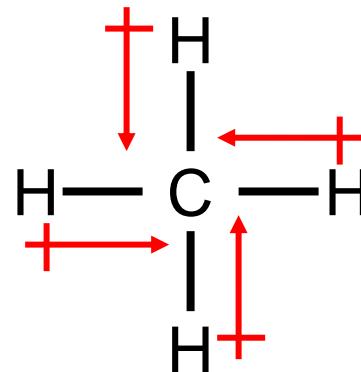
Ada momen dipol
Molekul polar



Ada momen dipol
Molekul polar



Tidak ada momen dipol
Molekul nonpolar



Tidak ada momen dipol
Molekul nonpolar

TABLE 10.3 Dipole Moments of Some Polar Molecules

| Molecule | Geometry | Dipole Moment (D) |
|------------------|--------------------|-------------------|
| HF | Linear | 1.92 |
| HCl | Linear | 1.08 |
| HBr | Linear | 0.78 |
| HI | Linear | 0.38 |
| H ₂ O | Bent | 1.87 |
| H ₂ S | Bent | 1.10 |
| NH ₃ | Trigonal pyramidal | 1.46 |
| SO ₂ | Bent | 1.60 |

Bagaimana teori Lewis menerangkan ikatan dalam H_2 dan F_2 ?

Berbagi 2 elektron antara 2 atom

Energi disosiasi ikatan

Panjang ikatan *Overlap dari*

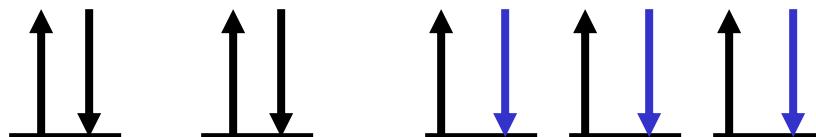
| | | | |
|-------|--------------|-------|--------------|
| H_2 | 436,4 kJ/mol | 74 pm | 2 orbital 1s |
|-------|--------------|-------|--------------|

| | | | |
|-------|--------------|--------|--------------|
| F_2 | 150,6 kJ/mol | 142 pm | 2 orbital 2p |
|-------|--------------|--------|--------------|

Teori ikatan valensi – ikatan yang dibentuk dengan berbagi elektron dari orbital atom yang *overlapping*.

Teori Ikatan Valensi dan NH₃

N – 1s²2s²2p³

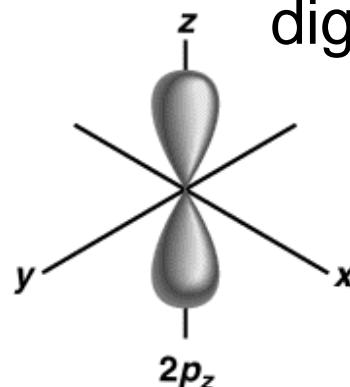
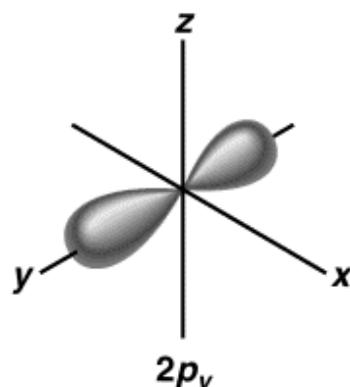
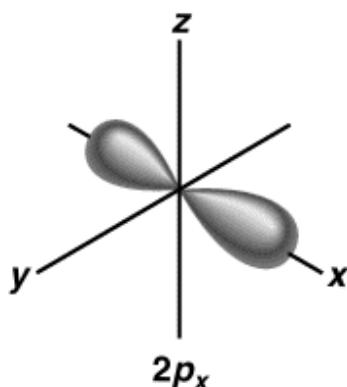


3 H – 1s¹

Bila ikatan yang dibentuk dari *overlapping* 3 orbital 2p pada nitrogen dengan orbital 1s pada tiap atom hidrogen, bagaimana bentuk geometri molekul NH₃?

Bila

3 buah orbital 2p digunakan, diramalkan sudut ikatan 90°

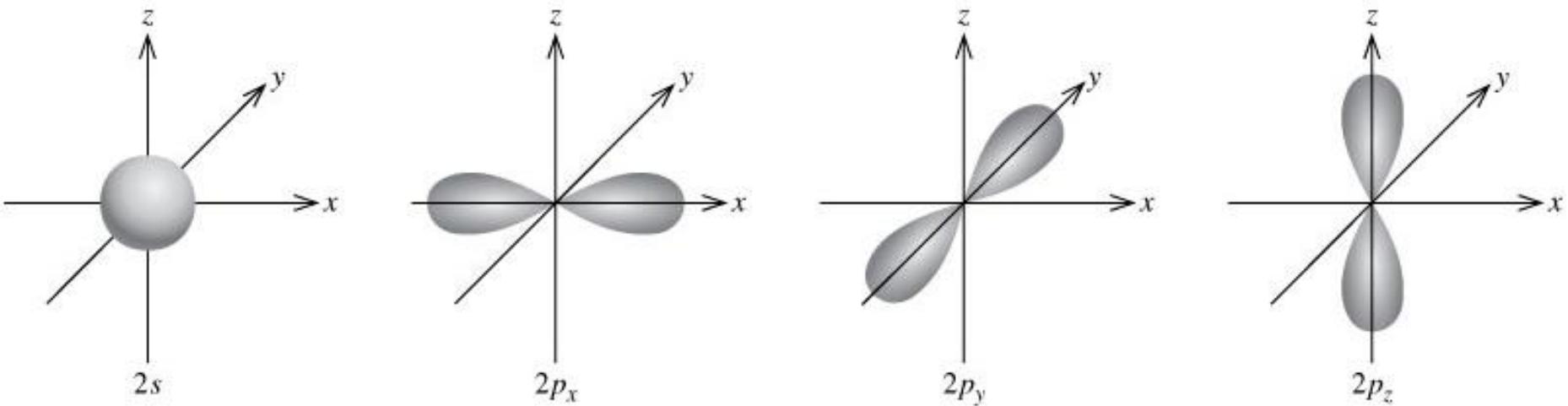


Sudut ikatan
H-N-H =
107,3°

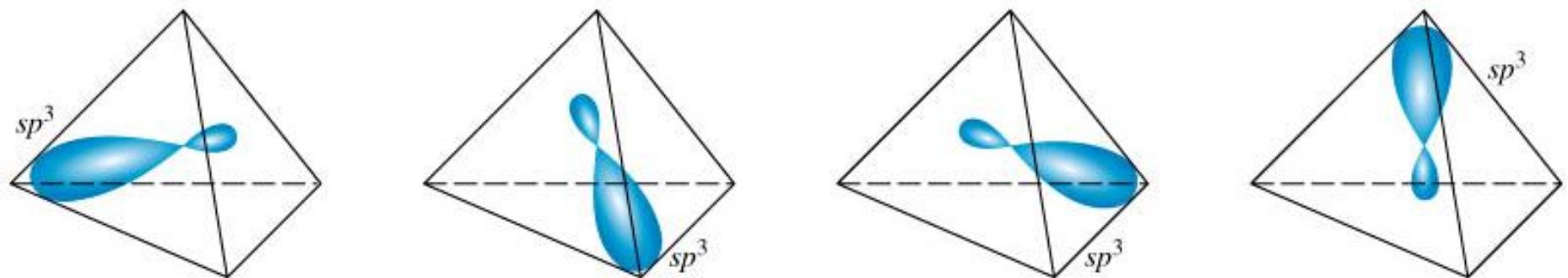
Hibridisasi – pencampuran 2 orbital atom atau lebih untuk membentuk orbital hibrida yang baru.

1. Campurkan 2 orbital atom yang tidak sama (contoh: orbital s dan p). Orbital hibrida mempunyai bentuk yang sangat berbeda dari bentuk orbital atom semula.
2. Jumlah orbital hibrida = jumlah orbital atom awal yang digunakan untuk hibridisasi.
3. Ikatan kovalen dibentuk oleh:
 - a. Overlap orbital hibrida dengan orbital atom
 - b. Overlap orbital hibrida dengan orbital hibrida lain

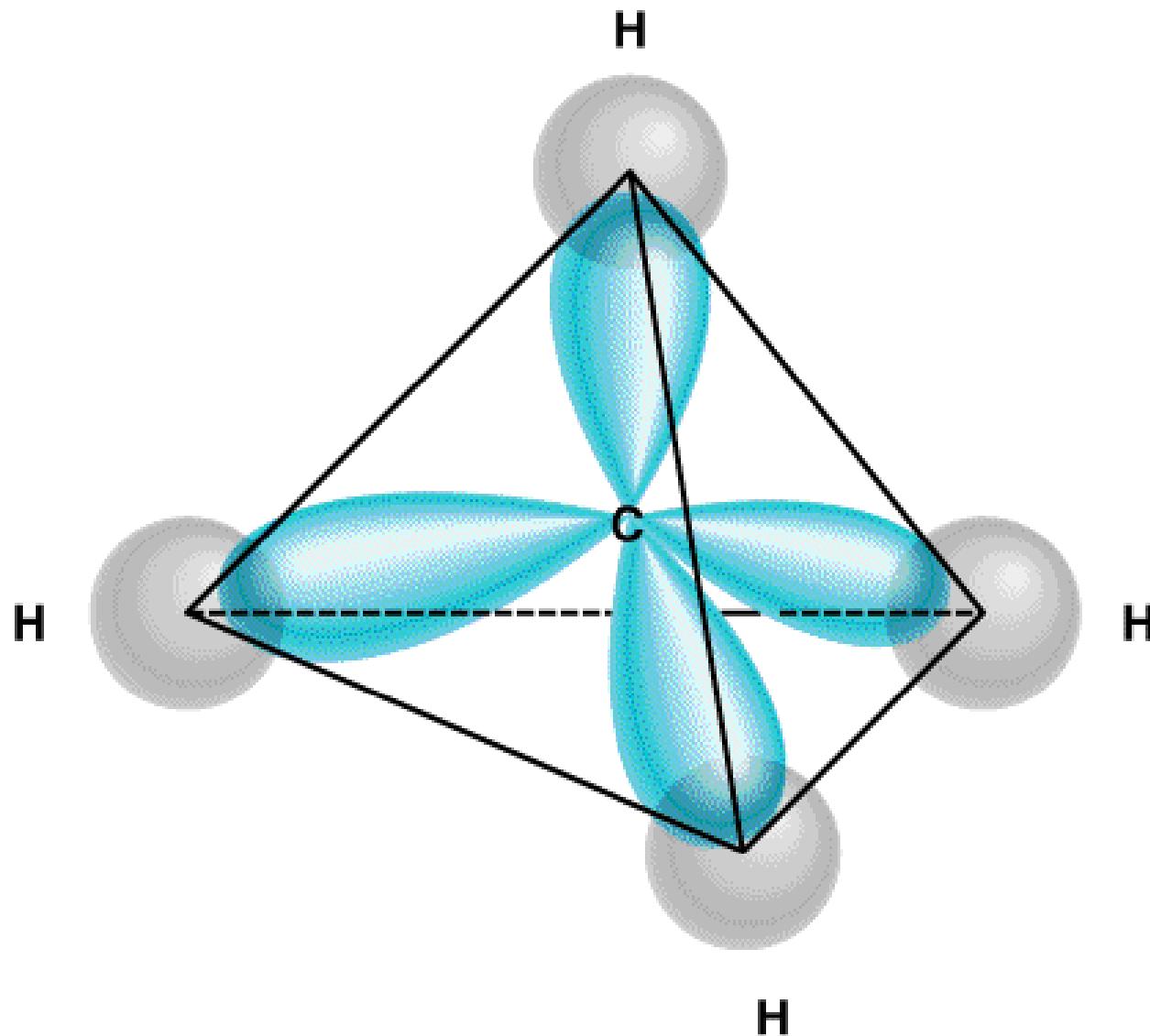
Pembentukan orbital hibrida sp^3



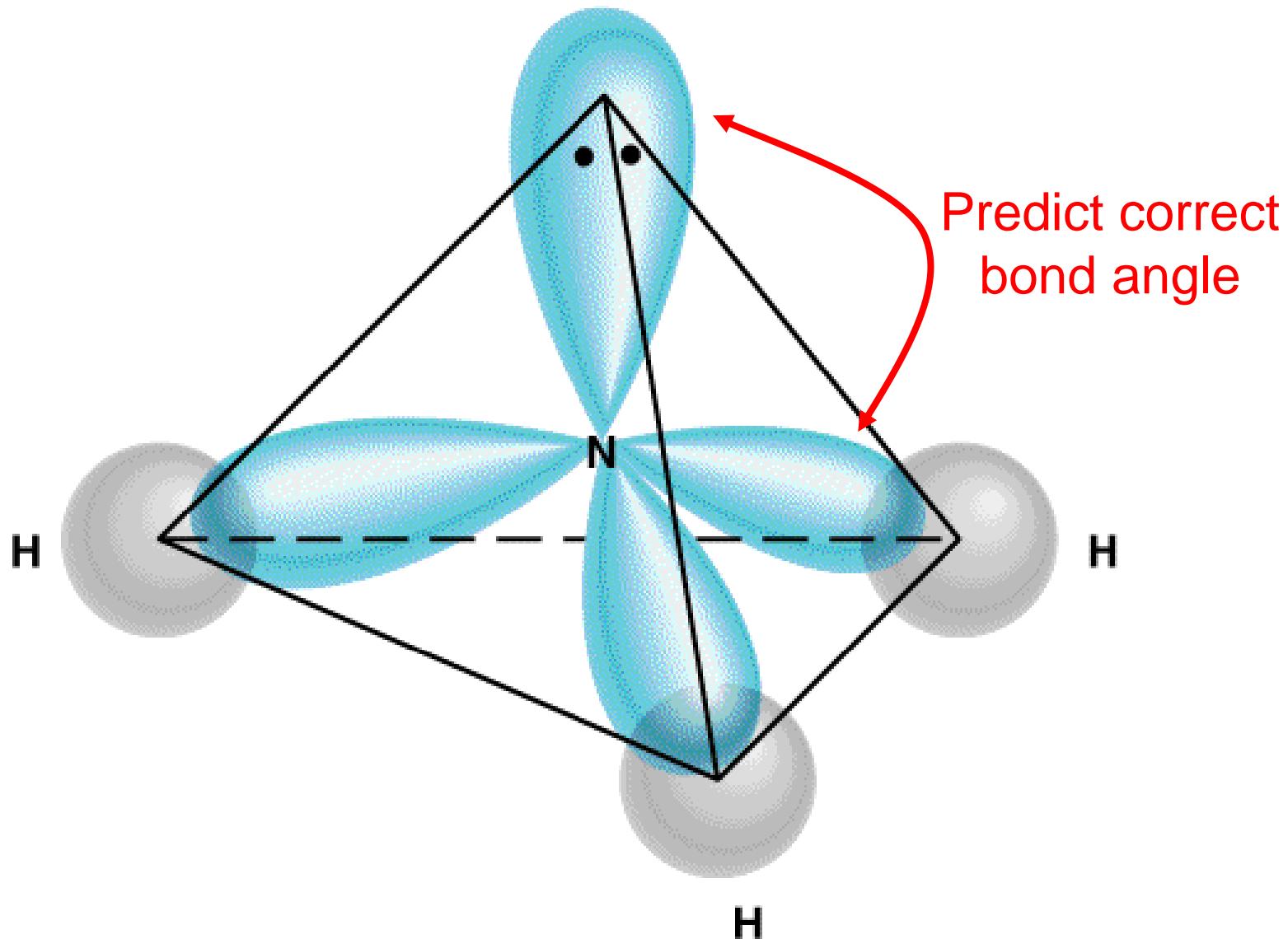
Hybridization
↓



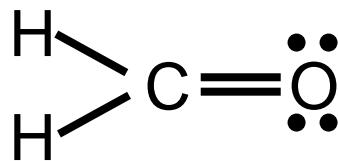
Formation of Covalent Bonds



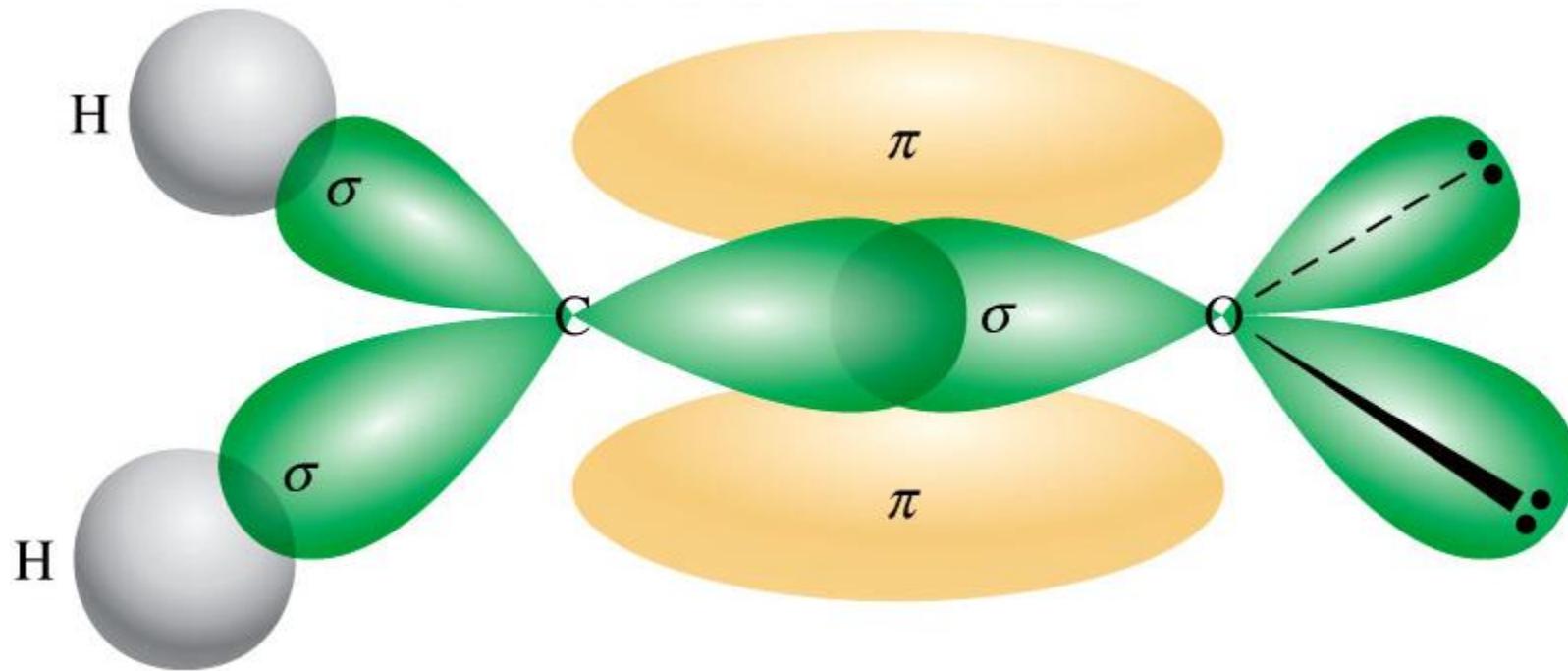
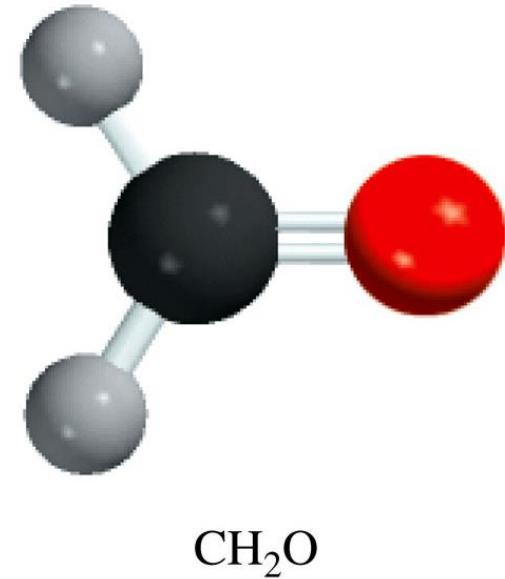
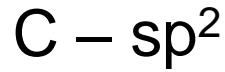
sp^3 – Hybridized N Atom in NH_3



Gambarkan ikatan pada CH_2O .



C – berikatan dengan 3 atom, 0
pasangan elektron bebas



Ikatan Sigma (σ) dan Pi (π)

Ikatan tunggal

1 ikatan sigma

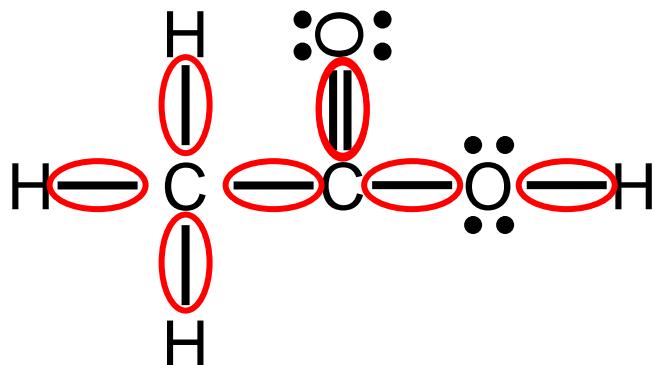
Ikatan rangkap 2

1 ikatan sigma dan 1 ikatan pi

Ikatan rangkap 3

1 ikatan sigma dan 2 ikatan pi

Berapa jumlah ikatan σ dan π yang ada dalam molekul asam asetat (cuka) CH_3COOH ?



$$\text{Ikatan } \sigma = 6 + 1 = 7$$

$$\text{Ikatan } \pi = 1$$

Molecular Scale Engineering for Drug Delivery

- *Mesoporous silica nanoparticles* (MSN) sangat menjanjikan untuk *drug delivery*, karena dapat mengantarkan obat ke lokasi yang ditargetkan dan mengurangi efek samping.
 - Luas permukaan 1 gram MSN ~ luas lapangan sepakbola
 - Pori-porinya dapat menyimpan molekul obat
 - Berbeda dari silika amorf, struktur seperti sarang lebah dan ukurannya yang kecil dapat mencegah kerusakan sel

