

## UJIAN TENGAH SEMESTER GENAP 2013/2014

Mata Kuliah	: Kimia Komputasi	Dosen	: Dr.Sc. Lukman Hakim
Kelas	: AB	Sifat ujian	: Buku terbuka
Hari / Tanggal	: Kamis, 17 April 2014	Waktu	: 13:00 - 15:00

---

1. Energi potensial yang timbul akibat interaksi antar partikel dalam suatu sistem dapat dideskripsikan sebagai

$$V = \sum_i \phi_i + \sum_i \sum_{j>i} \phi_{ij} + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} \phi_{ijk} + \dots \quad (1)$$

dengan  $\phi_i$  adalah energi potensial yang timbul akibat interaksi dengan medan potensial luar,  $\phi_{ij}$  akibat interaksi antar pasangan, dan  $\phi_{ijk}$  akibat interaksi tiga-badan (*three-bodies interaction*).

Pada sistem dengan kerapatan tinggi, seperti cairan, kontribusi  $\phi_{ijk}$  kemungkinan tidak dapat diabaikan. Misalkan, fungsi  $\phi_{ijk}$  dinyatakan sebagai

$$\phi_{ijk} = \frac{ar_{ij}^2 r_{ik}^2 r_{jk}^2 - b}{r_{ij}^5 r_{ik}^5 r_{jk}^5} \quad (2)$$

dengan  $a$  dan  $b$  adalah konstanta. Buatlah potongan kode program (dalam bahasa FORTRAN) untuk melakukan looping yang menghitung energi potensial  $V$  akibat interaksi tiga-badan untuk sistem dengan  $N$  molekul yang identik, yaitu:

$$V = \phi_{123} + \phi_{124} + \phi_{125} + \dots + \phi_{(N-2)(N-1)N} \quad (3)$$

2. Interaksi non-ikatan yang terjadi antara molekul biasanya dapat diklasifikasikan menjadi dua: van der Waals dan elektrostatik. Interaksi van der Waals, antar dua molekul, dapat dimodelkan dengan potensial Lennard-Jones 12-6

$$\phi_{ij}^{LJ} = 4\epsilon \left( \left[ \frac{\sigma}{r_{ij}} \right]^{12} - \left[ \frac{\sigma}{r_{ij}} \right]^6 \right) \quad (4)$$

dan interaksi elektrostatik, dapat dimodelkan dengan potensial Coulomb

$$\phi_{ij}^C = k \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (5)$$

Apabila suatu model molekul memiliki beberapa situs interaksi van der Waals dan situs elektrostatik, maka energi potensial antar pasangan  $\phi_{ij}$  merupakan penjumlahan dari semua kontribusi situs interaksi tersebut.

Misalkan metanol dimodelkan memiliki situs interaksi Lennard-Jones pada gugus metil  $\text{CH}_3$  ( $\sigma_{\text{Me}}$ ,  $\epsilon_{\text{Me}}$ ) dan gugus  $\text{OH}$  ( $\sigma_{\text{OH}}$ ,  $\epsilon_{\text{OH}}$ ), dan memiliki situs elektrostatik berupa muatan  $+q$  pada gugus metil  $\text{CH}_3$  dan  $-q$  pada gugus  $\text{OH}$ , nyatakan energi potensial yang timbul akibat interaksi dua molekul metanol  $\phi_{ij}$  sebagai penjumlahan dari kontribusi energi potensial interaksi antar situs-situs tersebut.