

PERANAN MATEMATIKA DALAM KIMIA

Oleh

Isana SYL

Abstrak

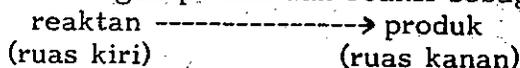
Ilmu kimia berkaitan dengan hitungan-hitungan yang perlu diselesaikan secara matematik, yang meliputi penjumlahan, pengurangan, per-kalian, pembagian, akar, logaritma, diferensial, integral, persamaan, grafik, deret, dan sebagainya. Mengingat luasnya peranan matematika dalam ilmu kimia, maka pada kesempatan ini hanya akan dibicarakan beberapa unsur matematika yang seringkali dijumpai dalam ilmu kimia.

Deret maclaurine dan deret taylor merupakan dasar dalam membicarakan teori gangguan atau teori perturbasi. Dalam menentukan energi elektron dalam suatu molekul melibatkan determinan dan persamaan pangkat tinggi.

Pendahuluan

Ilmu kimia tidak dapat dilepaskan dari matematika. Matematika merupakan ilmu dasar yang sekaligus juga sebagai alat dalam penyelesaian persoalan yang timbul dalam ilmu-ilmu yang lain, termasuk ilmu kimia. Ilmu kimia berkaitan dengan hitungan-hitungan yang perlu diselesaikan secara matematika. Untuk menyelesaikan masalah-masalah yang ada dalam ilmu kimia, dalam rangka mendapatkan tingkat keeksakan yang lebih tinggi diperlukan matematika. Dengan menggunakan matematika akan didapatkan, antara lain efisiensi waktu, biaya, dan tenaga.

Pembahasan tentang perhitungan jumlah zat yang terlibat dalam suatu reaksi kimia dengan berpedoman pada hukum Lavoisier bahwa jumlah setiap atom pada ruas kiri persamaan reaksi atau pada reaktan adalah sama dengan jumlah atom itu pada ruas kanan persamaan reaksi atau pada produk, jika reaksi dinyatakan dengan persamaan reaksi sebagai berikut.



menimbulkan beberapa persamaan matematika yang harus diselesaikan untuk mendapatkan koefisien zat-zat reaktan ataupun produk. Perbandingan koefisien reaksi ini sesuai dengan perbandingan jumlah molekul zat yang ada dalam reaksi.

Mengubah rumus empiris menjadi rumus molekul diper-

lukan data tentang massa molekul zat itu. Menentukan rumus empiris suatu zat memerlukan jasa matematika.

Mekanika kuantum yang mengandalkan adanya prinsip dualisme materi-gelombang dalam menyelesaikan permasalahan bentuk molekul memerlukan operator-operator matematika yang berkaitan dengan variabel-variabel yang dapat teramati, ilmu ukur ruang dan teori grup.

Persamaan kuadrat atau persamaan pangkat tinggi dapat dijumpai dapat perhitungan zat-zat dalam kesetimbangan kimia, penentuan energi elektron dalam molekul. Dalam penentuan energi elektron dalam molekul, selain melibatkan persamaan pangkat tinggi juga determinan, yang merupakan salah satu bentuk penataan besaran-besaran matematika. Deret maclaurine dan deret taylor merupakan dasar dalam membicarakan teori gangguan atau teori perturbasi.

Pada dasarnya dalam ilmu kimia diperlukan matematika yang meliputi penjumlahan, pengurangan, perkalian, pembagian, akar, logaritma, diferensial, integral, persamaan, grafik, deret, dan sebagainya. Oleh karena luasnya peranan matematika dalam ilmu kimia, maka perlu penguasaan matematika untuk mempelajari ilmu kimia. Dalam kesempatan ini akan dibicarakan beberapa unsur matematika yang seringkali dijumpai dalam mempelajari ilmu kimia.

Deret Maclaurine

Setiap bilangan tertentu memiliki angka atau lambang bilangan yang berbeda bila basis berbeda. Sebagai contoh, bilangan lima puluh tujuh dapat memiliki lambang bilangan sebagai berikut:

$5 \times 10^1 + 7 \times 10^0$ bila menggunakan basis 10

$7 \times 8^1 + 1 \times 8^0$ bila menggunakan basis 8

dan seterusnya sehingga suatu bilangan dapat diberi lambang sebagai berikut:

$$a_1x^1 + a_0x^0 \text{ atau } a_nx^n + \dots + a_2x^2 + a_1x^1 + a_0x^0$$

$$\text{atau } \dots + a_2x^2 + a_1x^1 + a_0x^0$$

Bila suatu bilangan tertentu dilambangkan dengan $f(x)$, suatu fungsi, maka dapat disimpulkan bahwa setiap fungsi memiliki a_i yang khas, yang dapat dituliskan sebagai berikut:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots$$

Untuk nilai $x = 0$, maka nilai $f(0) = a_0$ atau $a_0 = f(0)$.

Bila $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + \dots$, maka $f'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + \dots$. Untuk nilai $x = 0$, maka nilai $f'(0) = a_1$ atau $a_1 = \frac{f'(0)}{1}$

Nilai $f''(x) = 2a_2 + 6a_3x + 12a_4x^2 + \dots$; untuk nilai $x = 0$, maka $f''(0) = 2a_2$ atau $a_2 = \frac{f''(0)}{1 \times 2}$

Nilai $f'''(x) = 6a_3 + 24a_4x + \dots$; untuk nilai $x = 0$, maka $f'''(0) = 6a_3$ atau $a_3 = \frac{f'''(0)}{1 \times 2 \times 3}$ dan seterusnya, hingga diperoleh:

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \dots$$

(persamaan ini sering disebut deret maclaurine).

Deret maclaurine merupakan dasar dalam membicarakan teori gangguan atau teori perturbasi. Teori perturbasi merupakan faktor koreksi terhadap gerakan elektron. Vibrasi elektron tidak mengikuti isolator harmonis dan rotasinya bukan rotasi yang tegar sehingga sifat gelombang dari elektron yang dinyatakan secara matematis oleh Schrodinger sebagai:

$$\hat{H} \Psi_m^0 = E_m^0 \Psi_m^0$$

\hat{H}^0 : operator Hamilton (operator energi total)

E_m^0 : eigen value (energi total elektron)

Ψ_m^0 : fungsi gelombang elektron (eigen fungsi dari operator Hamilton)

perlu diadakan koreksi karena persamaan tersebut hanya berlaku bila partikel berotasi tegar dan berisolasi harmonis. Teori perturbasi memberi koreksi terhadap \hat{H}^0 sebesar $\lambda \hat{H}'$ sehingga menjadi

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{H}'$$

$$\Psi_m = \Psi_m^0 + \lambda \Psi_m^{(1)} + \lambda^2 \Psi_m^{(2)} + \lambda^3 \Psi_m^{(3)} + \dots$$

$$E_m = E_m^0 + \lambda E_m^{(1)} + \lambda^2 E_m^{(2)} + \lambda^3 E_m^{(3)} + \dots$$

$$\begin{aligned}
 H\Psi_m &= E_m \Psi_m \\
 (H^0 + \lambda H^1)(\Psi_m^0 + \lambda \Psi_m^1 + \lambda^2 \Psi_m^2 + \lambda^3 \Psi_m^3 + \dots) &= \\
 (E_m^0 + \lambda E_m^1 + \lambda^2 E_m^2 + \lambda^3 E_m^3 + \dots) & \\
 (\Psi_m^0 + \lambda \Psi_m^1 + \lambda^2 \Psi_m^2 + \lambda^3 \Psi_m^3 + \dots). &
 \end{aligned}$$

Deret maclaurine dapat membuktikan bahwa $e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$. Fungsi gelombang elektron dapat memiliki bentuk persamaan gelombang seperti persamaan tersebut sehingga bila dapat dibuktikan secara matematis bahwa $e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$, maka akan diperoleh keeksakan yang lebih tinggi, waktu, biaya, dan tenaga yang efisien.

Deret maclaurine:

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \dots$$

$$\sin x = \sin(0) + \frac{\cos(0)}{1!}x + \frac{-\cos(0)}{2!}x^2 + \frac{\sin(0)}{3!}x^3 + \dots$$

$$= x - \frac{x^3}{3!} + \dots$$

$$\cos x = \cos(0) + \frac{-\sin(0)}{1!}x + \frac{-\cos(0)}{2!}x^2 + \frac{\sin(0)}{3!}x^3 + \dots$$

$$= 1 - \frac{x^2}{2!} + \dots$$

$$e^x = e^0 + \frac{e^0}{1!}x + \frac{e^0}{2!}x^2 + \frac{e^0}{3!}x^3 + \dots$$

$$= 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

$$e^{i\theta} = 1 + i\theta - \frac{\theta^2}{2!} - \frac{i\theta^3}{3!} + \dots$$

$$= (1 - \frac{\theta^2}{2!} + \dots) + i(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots)$$

$$= \cos \theta + i \sin \theta.$$

Deret Taylor

Deret Taylor merupakan penyempurnaan deret Maclaurine. Deret Maclaurine:

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}x^3 + \dots$$

Bila x dinamakan $y-a$, maka untuk $x=0$, $y=a$.

$$f(x) = f(y-a) = F(y).$$

untuk $x=0$, maka nilai $F(y) = F(a)$ sehingga

$$F(y) = F(a) + \frac{F'(a)}{1!}(y-a) + \frac{F''(a)}{2!}(y-a)^2 + \frac{F'''(a)}{3!}(y-a)^3 + \dots(i)$$

Bila $F(y)$ dinamakan $f(x)$, maka persamaan (i) dapat dituliskan sebagai

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots$$

(persamaan ini sering disebut dengan deret Taylor).

Determinan atau Matriks Kuadrat

Determinan atau matriks kuadrat merupakan matriks yang memiliki jumlah baris sama dengan jumlah kolom.

Contoh:

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \text{ atau } \begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix}$$

Masing-masing elemen atau anggota di dalam determinan diberi simbol A_{ij} , i menunjukkan baris dan j menunjukkan kolom. Nilai dari suatu determinan dapat dihitung dengan cara minor yang ditandai atau cara kofaktor. Untuk membentuk kofaktor, minor ditandai menurut posisi A_{ij} dalam determinan semula dengan $(-1)^{i+j}$. Tanda untuk elemen a adalah $(-1)^{1+1} =$ positif, elemen b adalah $(-1)^{1+2} =$ negatif, elemen c adalah $(-1)^{1+3} =$ positif, dan seterusnya. Sebagai contoh nilai dari determinan

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{vmatrix} = 1 \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} - 2 \begin{vmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} + 3 \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 3 \end{vmatrix} \\ = -5 + 8 - 6 \\ = -3$$

atau

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{vmatrix} = 1 \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} + 2 \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} \\ = -5 + 2 \\ = -3$$

atau yang lain karena kofaktor dapat berbeda, tetapi nilai suatu determinan adalah tertentu.

Banyak problema fisika yang dengan mudah dapat diselesaikan dengan cara penataan besaran-besaran matematika, misal dalam bentuk determinan atau matriks. Dua sifat determinan yang sangat penting dan berguna adalah:

1. Harga determinan berubah tandanya bila elemen dalam baris atau kolom ditukar tempatnya.

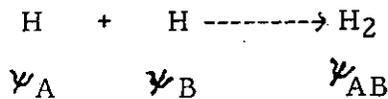
$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} c & d \\ a & b \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} b & a \\ d & c \end{vmatrix}$$

2. Harga determinan sama dengan nol bila elemen baris atau kolom identik.

$$\begin{vmatrix} a & a \\ b & b \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & b \\ a & b \end{vmatrix} = 0$$

Determinan yang memiliki nilai nol sering disebut determinan sekuler. Dalam penentuan energi suatu molekul melibatkan determinan sekuler. Yang menjadi pertanyaan, mengapa nilai determinan sekuler sama dengan nol? Hal ini dapat dijawab secara matematis.

Molekul H_2 :



ψ_A dan ψ_B sudah diketahui pernyataannya real. Menurut Linear Combination of Atomic Orbital $\psi_{AB} = C_A \psi_A + C_B \psi_B$ dan menurut postulat mekanika kuantum

$$\langle E \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}$$

Tanda * menunjukkan konjugasi. Konjugasi dari bilangan real adalah bilangan itu sendiri.

$$\begin{aligned} \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau &= \int (C_A \psi_A + C_B \psi_B)^* \hat{H} (C_A \psi_A + C_B \psi_B) d\tau \\ &= \int (C_A \psi_A + C_B \psi_B) (C_A \hat{H} \psi_A + C_B \hat{H} \psi_B) d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int C_A^2 \psi_A \hat{H} \psi_A d\tau + \int C_A C_B \psi_B \hat{H} \psi_A d\tau + \\
 &\quad \int C_A C_B \psi_A \hat{H} \psi_B d\tau + \int C_B^2 \psi_B \hat{H} \psi_B d\tau \\
 &= C_A^2 \int \psi_A \hat{H} \psi_A d\tau + C_A C_B \int \psi_B \hat{H} \psi_A d\tau + \\
 &\quad C_A C_B \int \psi_A \hat{H} \psi_B d\tau + C_B^2 \int \psi_B \hat{H} \psi_B d\tau \\
 &\qquad \qquad \qquad \int \psi_A \hat{H} \psi_A d\tau = H_{AA}
 \end{aligned}$$

$$\int \psi_B \hat{H} \psi_A d\tau = \int \psi_A \hat{H} \psi_B d\tau = H_{AB}$$

$$\int \psi_B \hat{H} \psi_B d\tau = H_{BB}$$

$$= C_A^2 H_{AA} + 2C_A C_B H_{AB} + C_B^2 H_{BB}$$

$$\begin{aligned}
 \int \psi^* \psi d\tau &= \int (C_A \psi_A + C_B \psi_B)^* (C_A \psi_A + C_B \psi_B) d\tau \\
 &= \int C_A^2 \psi_A \psi_A d\tau + \int C_A C_B \psi_A \psi_B d\tau + \int C_A C_B \psi_A \psi_B d\tau + \\
 &\quad \int C_B^2 \psi_B \psi_B d\tau
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= C_A^2 \int \psi_A \psi_A d\tau + C_A C_B \int \psi_A \psi_B d\tau + C_A C_B \int \psi_A \psi_B d\tau + \\
 &\quad C_B^2 \int \psi_B \psi_B d\tau
 \end{aligned}$$

$$\int \psi_A \psi_A d\tau = \int \psi_B \psi_B d\tau = 1$$

$$\int \psi_A \psi_B d\tau = S_{AB}$$

$$= C_A^2 + 2C_A C_B S_{AB} + C_B^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{C_A^2 H_{AA} + 2C_A C_B H_{AB} + C_B^2 H_{BB}}{C_A^2 + 2C_A C_B S_{AB} + C_B^2}$$

Dengan meminimkan nilai (E) akan diperoleh persamaan dalam C_A dan C_B . Nilai (E) minimum bila

$$\left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial C_A} \right) C_B = 0 \text{ dan}$$

$$\left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial C_B} \right) C_A = 0.$$

Karena $\langle E \rangle = \frac{u}{v}$, dengan $u = C_A^2 H_{AA} + 2C_A C_B H_{AB} + C_B^2 H_{BB}$ dan $v = C_A^2 + 2C_A C_B S_{AB} + C_B^2$, maka derivatif (E) ke x adalah:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \frac{u}{v}}{\partial x} &= \frac{v \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial v}{\partial x}}{v^2} \\ &= \frac{1}{v} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{E}{v} \frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned}$$

Untuk $\left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial C_A} \right) C_B = 0$, maka

$$\frac{1}{v} (2C_A H_{AA} + 2C_B H_{AB}) - \frac{E}{v} (2C_A + 2C_B S_{AB}) = 0$$

$$\frac{2}{v} \{ (C_A H_{AA} + C_B H_{AB}) - E (C_A + C_B S_{AB}) \} = 0$$

$$C_A H_{AA} - E C_A + C_B H_{AB} - C_B S_{AB} E = 0$$

$$C_A(H_{AA} - E) + C_B(H_{AB} - S_{AB}E) = 0 \dots \dots \dots (1)$$

Dengan cara yang sama untuk $(-\frac{\partial E}{\partial C_B})C_A = 0$

$$\frac{2}{v} (C_A H_{AB} + C_B H_{BB}) - \frac{2E}{v} (C_A S_{AB} + C_B) = 0$$

$$\frac{2}{v} (C_A H_{AB} + C_B H_{BB} - EC_A S_{AB} - EC_B) = 0$$

$$C_B(H_{BB} - E) + C_A(H_{AB} - S_{AB}E) = 0 \dots \dots \dots (2)$$

Dari persamaan (1) dan (2) diperoleh:

$$C_A = \frac{\begin{vmatrix} 0 & H_{AB}-S_{AB}E \\ 0 & H_{BB}-E \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} H_{AA}-E & H_{AB}-S_{AB}E \\ H_{AB}-S_{AB}E & H_{BB}-E \end{vmatrix}}$$

Nilai determinan pada pembilang sama dengan nol. Bila pembilang = 0, maka $C_A = 0$, padahal C_A tidak sama dengan nol sebab bila $C_A = 0$, maka $\psi_A = 0$. Hal ini tidak sesuai dengan kenyataan yang ada. Satu-satunya kemungkinan penyebut harus sama dengan nol atau

$$\begin{vmatrix} H_{AA}-E & H_{AB}-S_{AB}E \\ H_{AB}-S_{AB}E & H_{BB}-E \end{vmatrix} = 0$$

(persamaan ini disebut determinan sekuler).

Dengan demikian sudah dapat dijawab pertanyaan, mengapa nilai determinan sekuler sama dengan nol?

Dari determinan sekuler dapat dihitung nilai E (energi dari suatu molekul). E dapat memiliki beberapa nilai sesuai dengan fungsi gelombangnya. Untuk molekul hidrogen akan diperoleh dua nilai E sehingga ada dua macam fungsi gelombang, yaitu ψ_1 dan ψ_2 . Bila nilai E untuk masing-masing dimasukkan ke dalam persamaan (1) dan (2) akan diperoleh perbandingan antara C_A dan C_B . Dengan memasukkan nilai perbandingan C_A dan C_B ke dalam $\psi_{AB} = C_A \psi_A + C_B \psi_B$ dan menggunakan dasar fungsi ternormalkan dapat dihitung nilai C_A dan C_B .

$$\int \psi^2 d\tau = 1$$

Persamaan Pangkat Tinggi

Penentuan energi elektron pi (π) dengan metode orbital molekul Huckel melibatkan determinan dan persamaan pangkat tinggi.

$$E_{\pi} = \frac{H_{ij}}{S_{ij}} = \frac{(\psi_i | H | \psi_j)}{(\psi_i | \psi_j)}$$

H_{ij} = bila $i = j$ (integral coulomb)

= bila i tidak sama dengan j , tetapi i tetangga j

= 0 bila i tidak sama dengan j dan i bukan tetangga j .

H_{ij} dan H_{ji} = 0 sering disebut integral resonansi.

S_{ij} = 1 bila $i = j$ dan S_{ij} = 0 bila i tidak sama dengan j . Nilai

S_{ij} menunjukkan integral overlap (tumpukan).

Sebagai contoh akan ditinjau molekul butadiena: $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$. Dalam molekul butadiena ada 4 elektron pi (π) sehingga memiliki determinan sekuler sebagai berikut.

$$\begin{vmatrix} H_{11}-ES_{11} & H_{12}-ES_{12} & H_{13}-ES_{13} & H_{14}-ES_{14} \\ H_{21}-ES_{21} & H_{22}-ES_{22} & H_{23}-ES_{23} & H_{24}-ES_{24} \\ H_{31}-ES_{31} & H_{32}-ES_{32} & H_{33}-ES_{33} & H_{34}-ES_{34} \\ H_{41}-ES_{41} & H_{42}-ES_{42} & H_{43}-ES_{43} & H_{44}-ES_{44} \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha-E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha-E & \beta \end{vmatrix} = 0, \text{ bila } \frac{\alpha-E}{\beta} = x, \text{ maka}$$

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$x \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - 1 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} + 0 \begin{vmatrix} 1 & x & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & x \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0$$

$$x^2(x^2-1) - x(x-0) + 0(1-0) - 1(x^2-1) + (0-0) - 0(0-0) + 0 \cdot 0 = 0$$

$$x^4 - x^2 - x^2 - x^2 + 1 = 0$$

$$x^4 - 3x^2 + 1 = 0$$

$$\begin{aligned}
 x_{1,2}^2 &= \frac{3 \pm \sqrt{9-4}}{2} \\
 &= \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2} \\
 &= \frac{3 \pm 2,2}{2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x_1^2 &= \frac{3 + 2,2}{2} \\
 &= 2,6 \text{ -----} \rightarrow x = + 1,6
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x_2^2 &= \frac{3-2,2}{2} \\
 &= 0,4 \text{ -----} \rightarrow x = \pm 0,6
 \end{aligned}$$

Ada empat nilai E, yaitu $E_1 = \alpha + 1,6\beta$

$$E_2 = \alpha + 0,6\beta$$

$$E_3 = \alpha - 0,6\beta$$

$$E_4 = \alpha - 1,6\beta$$

	$\alpha - 1,6\beta$... orbital anti bonding
	$\alpha - 0,6\beta$... orbital non bonding
↑↓	$\alpha + 0,6\beta$... orbital bonding
↑↑	$\alpha + 1,6\beta$	

$$\begin{aligned}
 E_{\pi} &= 2(\alpha + 1,6\beta) + 2(\alpha + 0,6\beta) \\
 &= 4\alpha + 4,4\beta
 \end{aligned}$$

Dalam molekul benzena terdapat 6 elektron pi (π) sehingga akan memiliki determinan sekuler orde 6, yang selanjutnya akan diperoleh persamaan dengan pangkat 6. Demikian seterusnya, sehingga untuk dapat menghitung tingkat energi elektron pi perlu dikuasai tentang determinan dan persamaan pangkat tinggi. Tampak bahwa matematika sangat diperlukan dalam mempelajari kimia. Oleh karenanya, untuk lebih mendalami kimia tidak dapat melepaskan diri untuk lebih mendalami matematika.

Penutup

Pembicaraan di atas hanya membicarakan peranan matematika dalam ilmu kimia dalam lintasan kecil, masih banyak contoh-contoh peranan matematika dalam ilmu kimia yang perlu dibicarakan lebih lanjut, yang belum dibicarakan pada kesempatan ini.

Karena luasnya peranan matematika dalam ilmu kimia, maka penguasaan matematika sangat diperlukan dalam mempelajari ilmu kimia. Dalam mengajarkan ilmu kimia, baik di tingkat SMTA maupun di perguruan tinggi perlu digunakan pendekatan matematika untuk mendapatkan tingkat keeksakan yang lebih tinggi serta efisiensi waktu, biaya, dan tenaga.

Daftar Pustaka

- Hanna, Melvin W. 1969. *Quantum Mechanics In Chemistry*. New York: Addison-Wesley.
- Pauling. 1935. *Introduction To Quantum Mechanics*. New York: McGraw-Hall Book Company.
- Sakurai. 1985. *Modern Quantum Mechanics*. New York: Addison-Wesley Publishing Company.
- Surdia, Noer M. 1986. *Ikatan Kimia*. Jakarta: Penerbit Karunika.
- Utoro Yahya dan Djaka Sasmita. 1990. *Dasar-dasar Ikatan Kimia*. Yogyakarta: FMIPA UGM.