

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Hampir semua lapisan masyarakat tidak terlepas dari bahan obat-obatan, pewangi ataupun kosmetik. Produk ini sudah mulai menjadi kebutuhan pokok dalam kehidupan masyarakat. Industri pewangi, kosmetik dan farmasi umumnya menggunakan senyawa berkerangka asetal sebagai bahan tambahan karena aroma yang dimilikinya. Senyawa-senyawa berkerangka asetal juga dapat ditemukan dalam berbagai aplikasi produk sehari-hari misalnya pemakaian surfaktan untuk pembersih dan pencucian serta penggunaan bahan aditif makanan dan minuman. Kelebihan senyawa asetal menyebabkan senyawa-senyawa asetal terus menjadi bahan sintesis yang berkembang dengan reaksi sintesis yang digunakan adalah reaksi asetalisasi (Holilah, 2012).

Reaksi asetalisasi merupakan salah satu strategi yang banyak digunakan dalam multi tahap sintesis senyawa-senyawa organik multifungsi dengan cara proteksi gugus karbonil yang biasa berasal dari aldehid atau keton. Pada umumnya reaksi ini dilakukan dengan cara mereaksikan senyawa-senyawa yang mengandung gugus karbonil dengan alkohol dan menggunakan katalis asam atau dengan agen dehidrasi seperti trimetil ortoformat (Arrozi, 2014).

Menurut Ali Amoozadeh (2013), asetalisasi merupakan salah satu reaksi yang penting dengan metode proteksi terhadap aldehid dan keton. Reaksi asetalisasi mudah dikonversi menjadi senyawa yang lebih berguna maka reaksinya sangat perlu untuk disintesis lebih lanjut lagi. Asetalisasi biasanya digunakan antara karbonil dengan alkohol dan dikatalis oleh asam atau agen hidrasi misalnya orto-ester. Dalam reaksi asetalisasi, berbagai hasil yang diperoleh menunjukkan hasil yang baik dan alkohol adalah reaktan yang berfungsi sebagai pelarut dalam kondisi netral dan lebih mudah digunakan untuk senyawa aldehid. Reaksi asetalisasi terhadap aldehida adalah salah satu reaksi yang telah banyak dipelajari dengan mereaksikan benzaldehida dan metanol dalam kondisi suhu kamar menggunakan beberapa jenis katalis.

Pada umumnya, katalis yang biasa digunakan dalam reaksi asetalisasi atau ketalisasi adalah asam protonik, asam lewis dan sejumlah transisi kompleks logam termasuk Rh (Rhodium), Pd (Palladium) dan Pt (Platinum). Meskipun diperoleh hasil yang baik dalam reaksi tetapi pemisahan katalis dari produk masih sulit dan katalis yang digunakan cukup mahal serta kurang stabil. Selain itu, preparasi asetal dan ketal biasanya menggunakan pelarut dengan proses yang menghasilkan limbah yang sulit dinetralkan atau harus dibuang. Untuk mengatasi hal tersebut digunakan asam ionik yang berfungsi sebagai katalis karena sifatnya yang unik yaitu tidak mudah menguap dan memiliki stabilitas cukup baik. Namun, untuk pemanfaatan yang praktis cairan ionik ini masih terkendala biaya yang relatif mahal dan potensi besar yang menyebabkan korosi akibat pelepasan HCl (Duan, 2006).

Perkembangan teknologi (khususnya komputer) telah membuat ilmu kimia mengalami kemajuan yang pesat. Sejak lahirnya penemuan mekanika kuantum, dalam ilmu kimia berkembang bidang baru yaitu kimia komputasi. Kimia komputasi adalah cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (seperti gas, cairan, padatan), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Pemodelan kimia komputasi dapat membantu para kimiawan untuk: (1) Mendesain awal proses reaksi sintesis, (2) Mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi, (3) Melakukan simulasi reaksi dalam komputer, dan (4) Menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan (Priyanto, 2005).

Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Neji Besbes (2012). Mekanisme reaksi asetalisasi dari 1,2 – diol dan 1,3- diol dengan senyawa karbonil yang telah dikatalisasi oleh asam Bronsted (HCl, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, TsOH, AcOH) dan asam Lewis (SiO<sub>2</sub>, BF<sub>3</sub>) menghasilkan Dioxolane menggunakan program Gaussian 03 untuk perhitungan reaksi. Penelitian dilakukan secara komputasi kimia yaitu menghitung jumlah atom oksigen, atom karbon serta menghitung

kerapatan elektron di karbon karbonil aldehida dan berdasarkan hasil akhir penelitian diperoleh hasil yang baik antara eksperimen dan teorinya.

Salah satu software berbasis komputasi kimia yang dapat digunakan untuk menghitung mekanisme reaksi adalah Hyperchem. Hyperchem merupakan program yang handal dari pemodelan molekul yang mudah digunakan, fleksibel dan berkualitas. Dengan menggunakan visualisasi dan animasi tiga dimensi hasil perhitungan kimia kuantum, mekanika dan dinamika. Selanjutnya, hyperchem mampu mengkaji konsep permukaan energi potensial dan tiga kalkulasi dari permukaan energi potensial yaitu single point, optimasi geometri, dan dinamika molekul. Perhitungan ini memberikan nilai energi dan turunan yang dibutuhkan untuk membangun dan memeriksa permukaan energi potensial (Pranowo, 2000).

Komputasi kimia dalam penelitian ini digunakan untuk membedakan kalkulasi energi, dan untuk menjelaskan reaksi dan mekanisme pada level atom dan molekul. Untuk melakukan hal tersebut salah satu software yang dapat digunakan adalah Hyperchem. Berdasarkan uraian tersebut, perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk mensimulasi terjadinya reaksi asetalisasi sehingga dapat diprediksi keberhasilan reaksi tanpa biaya yang mahal. Oleh karena itu, penulis melakukan penelitian dengan judul: **“Perhitungan Mekanisme Reaksi Asetalisasi Benzaldehid Menggunakan Katalis Asam (HCl) Dengan Metode Komputasi (*Ab-Initio*)”**.

## 1.2. Batasan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah, maka penelitian ini dibatasi masalah-masalah sebagai berikut:

1. Penelitian ini dibatasi pada penentuan energi reaksi asetalisasi benzaldehid dengan katalis HCl.
2. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode ab-initio dari software hyperchem versi 8.0.

### 1.3. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang dan batasan masalah diatas, maka dirumuskan masalah yaitu bagaimana tingkat energi tiap tahapan dan ramalan reaksi asetalisasi (intermediet) dengan metode ab initio?

### 1.4. Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penyusunan penelitian adalah mengetahui energi tiap tahapan reaksi asetalisasi dengan metode ab initio dan meramalkan reaksi asetalisasi benzaldehida dan metanol dengan katalis HCl.

### 1.5. Manfaat Penelitian

Penelitian ini bermanfaat untuk menentukan energi molekul dan dapat menjadi acuan pemodelan/simulasi reaksi sehingga dapat memprediksi berjalannya reaksi sebelum melakukan uji coba di laboratorium dengan biaya reagen yang mahal.