

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Asetalisasi merupakan salah satu reaksi yang dapat dengan mudah dikonversi menjadi senyawa yang lebih berguna sehingga reaksinya sangat perlu untuk disintesis, asetalisasi 2-hidroksi benzaldehida dan metanol dengan katalis HCl menghasilkan senyawa berkerangka asetal yang kita kenal dengan *salicylaldehyde-dimethyl-acetal*. Industri pewangi, kosmetik, farmasi dan pangan umumnya menggunakan senyawa *salicylaldehyde-dimethyl-acetal* 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. Dalam reaksi ini, alkohol adalah salah satu reaktan yang sangat baik dan juga berfungsi sebagai pelarut, dalam kondisi netral reaksi asetalisasi lebih mudah digunakan untuk senyawa aldehida. Reaksi asetalisasi terhadap aldehida adalah salah satu reaksi yang telah banyak dipelajari dengan mereaksikan berbagai substrat benzaldehida salah satunya adalah 2-hidroksi benzaldehida dan metanol dalam kondisi suhu kamar menggunakan beberapa jenis katalis (Holilah, 2012).

Katalis yang biasa digunakan dalam reaksi asetalisasi atau ketalisasi adalah asam protonik, asam Lewis dan sejumlah transisi kompleks logam. Meskipun diperoleh hasil yang baik dalam sintesis 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, salah satu contoh adalah pemanfaatan komputer sebagai media eksperimen kimia, dalam eksperimen komputer model masih tetap menggunakan hasil dari pakar kimia teoritis, tetapi perhitungan dilakukan dengan komputer menggunakan algoritma yang dituliskan dalam bahasa pemrograman. Keuntungan dari metode ini adalah memungkinkannya menghitung sifat molekul yang kompleks dan hasil perhitungannya berkorelasi secara signifikan dengan eksperimen laboratorium (Pranowo, 2000). Kimia komputasi dapat melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (seperti gas, cairan, padatan), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Pemodelan secara komputasi dapat membantu para kimiawan untuk mendesain awal proses reaksi sintesis, mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi, melakukan simulasi reaksi dalam komputer, dan menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan (Priyanto, 2005).

Dalam eksperimen laboratorium, untuk membuktikan keberadaan semua senyawa yang terbentuk dalam mekanisme reaksi harus berdasarkan pengamatan hasil reaksi. Sedangkan, dengan metode komputasi pembuktian mekanisme dilakukan hanya berdasarkan perhitungan energi reaksinya, semakin rendah energinya semakin besar kemungkinannya untuk terjadi pada keadaan nyata. Mekanisme reaksi akan lebih mudah dipelajari dengan metode komputasi karena waktu komputasi yang lebih singkat dan biaya komputasi yang lebih murah (Bayu, 2008).

Software berbasis komputasi kimia yang dapat digunakan untuk menghitung mekanisme reaksi salah satunya 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).

Penelitian yang pernah dilakukan oleh Deby (2012), perhitungan mekanisme reaksi asetalisasi dari benzaldehida yang dikatalisasi oleh asam (HCl) menghasilkan *benzaldehyde-dimetil-acetal* menggunakan program *HyperChem versi 8.0*. Penelitian dilakukan secara komputasi kimia yaitu menghitung dan mengkalkulasi energi, dan berdasarkan hasil akhir penelitian menunjukkan bahwa reaksi pembentukan *benzaldehyde-dimethyl-acetal* berjalan secara spontan dengan selisih energi pembentukannya dengan benzaldehida sebesar -51,9294 Kj/mol dan -6,8002 Kj/mol.

Dalam penelitian ini komputasi kimia digunakan untuk menghitung dan mengkalkulasi energi serta menjelaskan reaksi dan mekanisme pada level atom dan molekul. Untuk melakukan hal tersebut digunakan software *HyperChem versi 8.0*. Berdasarkan uraian tersebut, perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk mensimulasi terjadinya reaksi asetalisasi dengan substrat benzaldehida yang berbeda sehingga dapat diprediksi berjalannya reaksi sebelum melakukan uji coba dilaboratorium dengan biaya reagen yang mahal. Oleh karena itu, penulis melakukan penelitian dengan judul: **“Perhitungan Mekanisme Reaksi Asetalisasi 2-Hidroksi Benzaldehida 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 reaksi asetalisasi 2-hidroksi benzaldehida dengan katalis asam HCl.
2. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode *ab initio* dari software *HyperChem versi 8.0*.
3. Basis yang digunakan dalam penelitian ini adalah Basis set 3-21G dan 6-31G* pada metode *ab initio*.

1.3 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang dan batasan masalah, maka dirumuskan masalah yaitu bagaimana tingkat energi tiap tahapan reaksi dan kestabilan molekul reaksi asetalisasi (intermediet) dengan metode *ab initio* dari software *HyperChem versi 8.0*?

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penyusunan penelitian ini adalah mengetahui jumlah energi tiap tahapan reaksi dan kestabilan molekul reaksi asetalisasi (intermediet) dengan metode *ab initio* dari software *HyperChem versi 8.0*.

1.5 Manfaat Penelitian

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