

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Istilah kimia teori dapat didefinisikan sebagai deskripsi matematika untuk kimia, sedangkan kimia komputasi biasanya digunakan ketika metode matematika dikembangkan dengan cukup baik untuk dapat digunakan dalam program komputer (Priyanto, 2005). 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 (Priyanto, 2005). Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (seperti gas, cairan, padatan) dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Contoh sifat-sifat molekul yang dihitung antara lain struktur (yaitu letak atom-atom penyusunnya), energi dan selisih energi, muatan, momen dipol, kereaktifan, frekuensi getaran dan besaran spektroskopi lainnya (Priyanto, 2005).

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. Sifat-sifat molekul seperti energi, struktur, momen dipol, keterpolaran, atau hyperpolarizability merupakan beberapa besaran yang dapat dihitung lewat perhitungan. Dalam komputasi molekul, terdapat beberapa teknik untuk menghitung sifat-sifat molekul, yaitu mekanika molekul, teori fungsi kerapatan atau teori struktur elektron (Pranowo, 2009).

Salah satu pemanfaatan teknik komputasi kimia adalah untuk mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi, yaitu mekanisme reaksi asetalisasi. Pada metode eksperimen, mekanisme perlu dibuktikan keberadaan semua senyawa yang terbentuk berdasarkan pengamatan laboratorium. 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 kini menjadi lebih mudah dipelajari dengan metode komputasi kimia karena waktu perhitungan yang lebih singkat dan biaya perhitungan yang lebih murah seiring dengan peningkatan kinerja komputer dan murahnya harga komputer. Sebelum lahirnya kimia komputasi, para kimiawan mencoba mempelajari suatu mekanisme reaksi berdasarkan percobaan. Namun, kini mekanisme reaksi menjadi lebih mudah dikaji dan dipelajari dengan menggunakan teknik komputasi kimia (Bayu, 2008).

Asetalisasi merupakan reaksi antara senyawa aldehid atau keton dengan senyawa alkohol yang dikatalisis oleh katalis asam untuk membentuk suatu senyawa asetal $R_2C(OR')_2$. Reaksi asetalisasi berfungsi sebagai protektor senyawa yang memiliki gugus karbonil dari proses reduksi. Selain itu senyawa dengan gugus asetal diketahui memiliki fungsi sebagai suatu zat aditif dalam industri parfum, detergen dan kosmetik (Pranowo, 2009). Reaksi asetalisasi terhadap aldehida adalah salah satu reaksi yang telah banyak dipelajari dengan mereaksikan berbagai substrat benzaldehida salah satunya adalah 2-metoksi 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).

Salah satu basic 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 2-Metoksi 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 reaksi asetalisasi 2-metoksi 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* menggunakan software *HyperChem versi 8.0*

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penyusunan penelitian ini adalah:

1. Mengetahui besaran energi tiap tahapan reaksi
2. Mengetahui kestabilan molekul pada reaksi asetalisasi (intermediet) dengan metode *ab initio* menggunakan 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.