

**PENGARUH JENIS ION HALOGEN TERHADAP BESARNYA ENERGI
PADA REAKSI REDUKSI NITROBENZENA MENJADI
ANILIN MENGGUNAKAN METODE *DENSITY
FUNCTIONAL THEORY* (DFT)**

Oleh:

Sapransyah Rangkuti (4152210007)

Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Medan

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan pengaruh jenis ion halogen terhadap besarnya energi pada reaksi reduksi Nitrobenzena menjadi Anilin menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Dalam penentuan pengaruh jenis ion halogen ditentukan perubahan energi ΔE dari Hidrogenasi Nitrobenzena, Hidrogenasi 4-Flouronitro benzena, Hidrogenasi 4-Kloronitro benzena dan Hidrogenasi 4-Bromonitro benzena. Dalam penentuan energi senyawa tersebut digunakan perhitungan kimia komputasi menggunakan perangkat lunak NWChem versi 6.6 dan visualisasi hasil perhitungan menggunakan perangkat lunak Jmol versi 14.28.29. Perhitungan kimia komputasi tersebut menggunakan metode dengan fungsi hybrid B3LYP dengan basis set 3-21G. Hasil perhitungan kimi komputasi menunjukkan bahwa besarnya energi dari Hidrogenasi Nitrobenzena yang dihasilkan yaitu -772,611 KJ/mol, Hidrogenasi 4-Flouronitrobenzenayang dihasilkan yaitu -720,658KJ/mol, Hidrogenasi 4-Kloronitro benzena yang dihasilkan -805,511KJ/mol, dan Hidrogenasi 4-Bromonitro benzena yaitu -512,406 KJ/mol. Berdasarkan hasil perhitungan tersebut diperoleh perubahan energi pemebentukan yang diperoleh bahwa senyawa yang paling mudah terbentuk adalah 4-Kloronitro benzena. Hasil ini sesuai dengan hasil penentuan secara eksperiment di laboratorium.

Kata kunci : Hidrogenasi Nitrobenzena, Jenis Ion Halogen, Komputasi, Energi.