

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Turunan dari senyawa amida dan reaksi hidrolisisnya telah dijadikan bahan penelitian dalam kurun waktu yang cukup lama karena sangat bermanfaat khususnya dalam kepentingan medis dan penggunaan secara luas dalam industri kimia. Banyak penelitian terkait sintesis senyawa baru dari turunan senyawa amida seperti 3-hidroksiN-oktilpikolinamida; N-fenil-2-hidroksi benzamida; N-fenil-3-hidroksipikolinamida; 2 hidroksi-N-oktilbenzamida telah ditemukan (Husniati, 2008). Namun penelitian ini berhenti pada hasil sintesis empat senyawa tersebut sedangkan untuk mekanisme reaksi-reaksinya masih belum diteliti lebih lanjut (Ermawan, 2013).

Sim, dkk., (2009) juga telah melakukan penelitian terkait reaksi hidrolisis senyawa N-(2- metoksifenil) benzamida, tetapi mekanisme reaksi hidrolisisnya tidak dapat seluruhnya ditentukan karena terdapat berbagai kendala. Banyak studi telah dilakukan untuk mengatasi kendala dan hasilnya menunjukkan bahwa mekanisme reaksinya tidak berjalan dengan lancar khususnya pada amida sekunder yang strukturnya kompleks (Ermawan, 2013).

Jin, dkk., (2011) telah melakukan penelitian teoritik mengenai dua kemungkinan tahapan proses reaksi hidrolisis kondisi basa senyawa N-(2-metoksifenil) benzamida. Tahapan yang pertama adalah pembentukan zat antara tetrahedral akibat serangan nukleofilik dari atom karbon pada gugus karbonil oleh ion hidroksida dan tahap ke dua adalah transformasi dari zat antara 1 menjadi produk akhir. Pada tahap yang kedua ini juga terdapat tiga jalur mekanisme yang mungkin terjadi. Jalur yang pertama adalah proses migrasi proton intramolekuler, sedangkan jalur kedua dan ketiga adalah proses migrasi proton intermolekuler. Yamabe dkk., (2013) telah melakukan penelitian secara teoritis pula mengenai mekanisme reaksi hidrolisis senyawa etil benzoat dan N-etil benzamida (Ermawan, 2013).

Pemanfaatan teknologi seperti kimia komputasi dapat menjadi solusi bagi permasalahan tersebut. Metode kimia komputasi ini bersifat sangat fleksibel dan hampir semua materi praktek kimia baik dari level sederhana maupun dengan tingkat dengan kesulitan tinggi dapat dimodelkan dengan baik menggunakan kimia komputasi. Tersedianya berbagai macam software kimia komputasi secara gratis harus bisa dimanfaatkan guru terutama sebagai alternatif pengganti praktikum kimia di sekolah. Keuntungan lain pengguna kimia di sekolah adalah biayanya murah, memiliki akurasi yang tinggi, mempersingkat waktu praktek, tidak berbahaya dan tentu dapat membantu meningkatkan pemahaman siswa terhadap materi kimia secara optimal (Hadisaputra, dkk., 2017).

Kimia komputasi menunjukkan bahwa suatu sistem kimia dideskripsikan secara matematis menggunakan hukum fisika dan diselesaikan menggunakan komputer. Kimia komputasi juga bermanfaat untuk meramalkan struktur, mekanisme dan energi reaksi yang terjadi di laboratorium sehingga kimiawan dapat mendesain struktur dan meramalkan sifat suatu senyawa sebelum melakukan sintesis (Amalia, dkk., 2019).

Pemodelan senyawa menggunakan metode komputasi *Density Functional Theory* (DFT). Metode ini dipilih karena dapat memodelkan sistem molekul dengan akurat dan memerlukan data dalam tingkat mikroskopik yang berorelasi signifikan dengan hasil eksperimen (Amalia, dkk., 2019).

Kemajuan teknologi komputer saat ini telah memberikan suatu inovasi baru dalam bidang kimia dengan suatu inovasi baru dalam bidang kimia dengan munculnya kimia komputasi, sehingga permasalahan perhitungan untuk molekul yang kompleks bisa teratasi. Salah satu metode yang digunakan untuk perhitungan secara komputasi adalah *Density Functional Theory* (DFT). Metode ini memiliki keuntungan dibandingkan metode sebelumnya seperti *ab-initio* dan semi empiris karena bisa menghitung suatu senyawa kompleks dengan lebih sederhana dan cepat dengan hasil yang tidak jauh berbeda dari data eksperimen. Metode *Density Functional Theory* (DFT) mengandalkan densitas elektron sebagai besaran dasarnya sehingga persamaan *Schrodinger* dapat diselesaikan dengan lebih sederhana (Tromba dan Hambley, 2001).

Beberapa hasil penelitian sebelumnya menunjukkan hasil yang baik dalam penggunaan metode *Density Functional Theory* (DFT) antara lain: meramalkan struktur elektronik dan sifat transisi spin kompleks, memprediksi energi dan geometri senyawa, mempelajari termokimia reaksi dan vibrasi, mempelajari pengaruh isotop terhadap mekanisme reaksi, serta menghitung energi bebas kompleks transisi spin (Pongajow,dkk., 2017).

Penggunaan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada penelitian ini dilakukan menggunakan perhitungan berupa energi pada senyawa benzamida. Juga dilakukan perhitungan perubahan ΔE reaksi pada reaksi elektrokatalitik hidrogen pada senyawa benzamida dan perhitungan energi pada keadaan transisi pada penambahan H^+ dan penambahan e^- (elektron). Perhitungan dilakukan dengan kajian komputasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT).

1.2. Batasan masalah

Berdasarkan latar belakang masalah diatas, maka dapat disusun batasan masalah antara lain:

- 1) Software yang digunakan untuk visualisasi di komputasi adalah NWChen 6.6
- 2) Metode yang digunakan *Density Functional Theory* (DFT). yaitu fungsi hibrid B3LYP
- 3) Basis set yang digunakan adalah 3-21G.
- 4) Untuk visuallisasi hasil perhitungan hasil komputasi digunakan software Jmol dan Avogadro.
- 5) Senyawa yang diamati adalah (4 - klorokarbonil - benzial) - karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester ; (4- fenilkarbamil benzil) – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester ; [4-(2-nitro - fenil karbamoil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester ; [4 – 2 (amino - fenil karbamil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester

1.3. Rumusan masalah

- 1) Berapa besarnya energi pada pembentukan senyawa (4 - klorokarbonil - benzial) - karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan komputasi menggunakan metode B3LYP/3-21G ?
- 2) Berapa besarnya energi pada pembentukan senyawa (4- fenilkarbamil benzil) – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan komputasi menggunakan metode B3LYP/3-21G ?
- 3) Berapa besarnya energi pada pembentukan senyawa [4-(2-nitro - fenil karbamoil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan komputasi menggunakan metode B3LYP/3-21G ?
- 4) Berapa besarnya energi pada pembentukan senyawa [4 – 2 (amino - fenil karbamil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan komputasi menggunakan metode B3LYP/3-21G ?
- 5) Senyawa manakah yang paling stabil berdasarkan hasil perhitungan dari komputasi dengan metode B3LYP/3-21G ?

1.4. Tujuan penelitian

Penelitian ini bertujuan dilakukan untuk :

- 1) Menentukan perubahan energi (ΔE) pada pembentukan senyawa dari reaksi (4 - klorokarbonil - benzial) - karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester terhadap hasil perhitungan kimia komputasi menggunakan Metode *Density Functional Theory (DFT)*.
- 2) Menentukan perubahan energi (ΔE) pada pembentukan senyawa dari reaksi (4- fenilkarbamil benzil) – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester karbamat terhadap hasil perhitungan kimia komputasi menggunakan Metode *Density Functional Theory (DFT)*.
- 3) Menentukan perubahan energi (ΔE) pada pembentukan senyawa dari reaksi [4-(2-nitro - fenil karbamoil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester terhadap hasil perhitungan kimia komputasi menggunakan Metode *Density Functional Theory (DFT)*.

- 4) Menentukan perubahan energi (ΔE) pada pembentukan senyawa dari [4 – 2 (amino - fenil karbamil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester karbamat terhadap hasil perhitungan kimia komputasi Metode *Density Functional Theory* (DFT).
- 5) Menentukan Senyawa yang lebih stabil dari hasil perhitungan di komputasi dengan metode B3LYP dan basic set 3-21G.

1.5. Manfaat penelitian

Berdasarkan paparan diatas dimulai dari latar belakang masalah, rumusan masalah dan tujuan, maka manfaat yang diharapkan dalam penelitian ini adalah:

- 1) Penentuan besarnya energi senyawa benzamida dan turunannya menggunakan perhitungan kimia komputasi.
- 2) Mengetahui mekanisme reaksi pembentukan senyawa benzamida
- 3) Penentuan struktur dari senyawa(4 - klorokarbonil - benzil) - karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester ; (4- fenilkarbamil benzil) – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester ; [4-(2-nitro - fenil karbamoil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester ; [4 – 2 (amino - fenil karbamil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester