

PEMODELAN ISOMERISASI STRUKTUR MOLEKUL C₆H₁₄ MELALUI STUDI KOMPUTASI

Yuniar*¹, Eminari Simatupang², Sandro Freddy Lumban Tobing³,
Anisah Putri⁴, dan Yumi Marwati⁵

Program Studi Pendidikan Kimia FKIP Universitas Samudra

Jln. Kampus Meurandeh, Langsa 24416

*E-mail: nabilayuniarsinaga07@gmail.com

Abstrak

Reaksi isomerisasi C₆H₁₄ merupakan reaksi yang sederhana. Reaksi tersebut banyak mengandung informasi fundamental dari aspek struktur, termokimia. Tujuan dari penelitian ini adalah mempelajari reaksi isomerisasi C₆H₁₄ dilihat dari aspek struktur dan termokimia, melalui studi komputasi. Studi komputasi ini menggunakan pendekatan teori DFT, fungsional B3LYP, dan basis set 3-21G. Hasil perhitungan komputasi menunjukkan bahwa struktur heksana (isomer C₆H₁₄) lebih stabil dibandingkan dengan struktur yang lainnya. Hal ini sesuai dengan nilai energi yang dihitung lebih rendah dari semua bentuk isomer yaitu -618439.278109 kJ/mol dan titik didih 68.7°C serta titik leleh -95°C. Sementara struktur yang paling tidak stabil adalah 2,2- dimetil butane dengan energi -613443.100345 kJ/mol, titik didih 49.7°C serta titik leleh -98°C.

Kata kunci: isomerisasi struktur, termokimia, studi komputasi

Abstract

The C₆H₁₄ isomerization reaction is a simple reaction. The reaction contains a lot of fundamental information from structural, thermochemical aspects. The purpose of this research is to study the C₆H₁₄ isomerization reaction viewed from the structural and thermochemical aspects, through computational studies. This computational study uses the DFT theory approach, B3LYP functional, and 3-21G basis set. Computational calculation results show that the structure of hexane (C₆H₁₄ isomer) is more stable compared to other structures. This is in accordance with the calculated energy value lower than all isomeric forms, namely -618439.278109 kJ / mol and boiling point 68.7 ° C and melting point -95 ° C. While the most unstable structure is 2,2-dimethyl butane with energy -613443.100345 kJ/mol, boiling point 49.7 ° C and melting point -98 ° C.

Keywords: Structural isomerization, thermochemistry, computational study

PENDAHULUAN

N-heksana adalah hidrokarbon alkana rantai lurus yang memiliki 6 atom karbon dengan rumus molekul C₆H₁₄. Isomer heksana tidak reaktif dan digunakan sebagai pelarut inert dalam reaksi organik karena heksana bersifat sangat tidak polar. N-heksana dibuat dari hasil penyulingan minyak mentah

dimana untuk produk industrinya ialah fraksi yang mendidih pada suhu 65-70°C. Heksana digunakan di laboratorium untuk mengekstrak minyak dan lemak. Pemanfaatan n-heksana yang lainnya ialah sebagai cleansing agent pada tekstile, furniture, pembuatan sepatu, dan printing industri. N-heksana juga merupakan lem

khusus yang digunakan pada atap dan sepatu (Aziz, 2009).

Isomer konstitusional, memiliki sifat fisik yang berbeda. Perbedaannya mungkin tidak selalu besar, tetapi isomer konstitusional selalu ditemukan memiliki titik leleh yang berbeda, titik didih, kepadatan, indeks bias, dan sebagainya (Solomon, 2009).

Menurut (Siregar and Sinaga, 2017), Ilmu pengetahuan dan teknologi informasi mengalami kemajuan yang sangat pesat, sehingga kebutuhan akan informasi yang cepat, tepat dan akurat sangat dibutuhkan oleh setiap perusahaan, instansi, organisasi maupun bidang lainnya. Teknologi informasi merupakan hasil rekayasa manusia terhadap pengolahan data dan perhitungan-perhitungan yang cukup rumit. Salah satu produk dari pengetahuan dan teknologi adalah komputer. Komputer banyak digunakan sebagai alat bantu untuk mengolah data dan berbagai macam keperluan termasuk dalam penelitian sains untuk mempermudah, meminimalisir biaya dan mempersingkat waktu dalam penelitian. Contohnya adalah penelitian tentang geometri molekul dan pengaruhnya terhadap energi ikatan, titik didih, dan titik leleh suatu senyawa dengan waktu yang singkat dan biaya terjangkau.

Program komputer bersifat dinamis, dapat menampilkan struktur molekul di layar menjadi lebih “terlihat” dan “berperilaku” seperti “molekul nyata”. Dampak pembelajaran menggunakan program komputer pun telah banyak dilaporkan peneliti diantaranya dapat membantu siswa mengatasi kesulitan memahami struktur dan elemen simetri

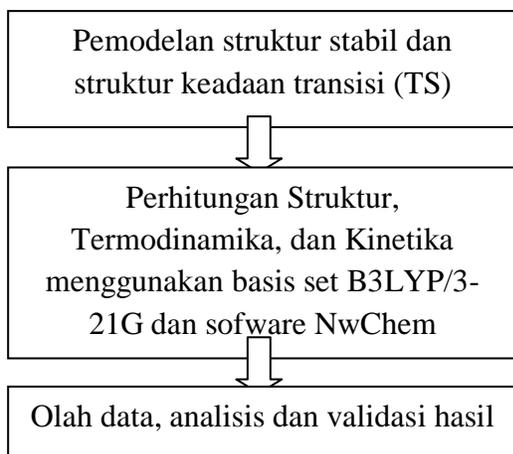
molekul kompleks, alat bantu 93 efektif untuk pengajaran, meningkatkan skor post test secara signifikan pada topik terkait sudut ikatan, sifat-sifat 3D molekul seperti kiralitas dan konformasi (Setyarini et al, 2017).

Software dapat digunakan sebagai media pembelajaran kimia, fisika, dan bahasa arab. Software tersebut dapat membantu guru dalam menyampaikan materi yang memerlukan dimensi tiga. Ada sebagian materi pembelajaran kimia lebih mudah dipahami siswa melalui dimensi tiga antara lain bentuk molekul, isomer, dan gaya antar molekul. Sehubungan dengan hal tersebut, maka akan sangat membantu kinerja guru apabila tersedia media pembelajaran bentuk molekul dikembangkan menggunakan software. Dengan demikian proses pembelajaran yang berlangsung diharapkan akan menjadi lebih baik, terarah, dan menarik bagi peserta didik (Muslim, 2017).

METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan 1 buah unit laptop Acer Intel® Celeron® Processor N3350 dan 4 buah software komputasi untuk windows 10 diantaranya: MarvinSketch 16.1.25, Avogadro 1.2.0n-win32, Metapad dan NWChem running shell v.0.2.

Aplikasi MarvinSketch dan Avogadro digunakan untuk pemodelan struktur molekul, sedangkan aplikasi Metapad dan NWChem digunakan untuk visualisasi dan analisis hasil ;perhitungan.



Gambar 1. Diagram alir penelitian (diadopsi oleh Hasby, dkk, 2016)

HASIL DAN PEMBAHASAN

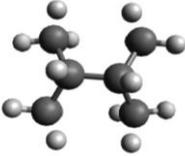
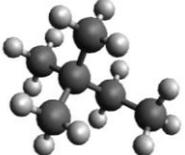
Penelitian ini menunjukkan berbagai bentuk molekul yang berbeda dari isomer C_6H_{14} , meskipun memiliki rumus molekul

yang sama namun memiliki bentuk geometri yang berbeda. Perbedaan geometri pada senyawa disebabkan oleh factor besar kecilnya energi yang dihasilkan oleh masing- masing molekul tersebut.

Perbedaan besar energi sangat berpengaruh pada kestabilan struktur suatu senyawa. Semakin besar energi maka senyawa tersebut semakin tidak stabil, sebaliknya semakin kecil energi yang dihasilkan maka semakin stabil struktur geometri senyawa tersebut. Perbedaan geometri mencakup perbedaan panjang ikatan yang dimiliki oleh masing-masing unsur pembentuk suatu senyawa tersebut, serta perbedaan sudut ikatan pada senyawa tersebut.

Tabel 1. hasil analisis data isomer C_6H_{14}

No	Struktur	Nama	Sudut ikatan	Panjang ikatan	Energi (kj/mol)
1.		Heksana	112,3°	1,545 Å	-618439.278109
2.		2-metil pentana	71,6°	1,455 Å	-616849.107733
3.		3-metil pentana	112,5°	1,555 Å	-616631.570604

No	Struktur	Nama	Sudut ikatan	Panjang ikatan	Energi (kj/mol)
4.		2,3-dimetil butana	113°	1,555 Å	-616183.820799
5.		2,2-dimetil butana	108,8°	1,548 Å	-613443.100345

Karakteristik geometri isomer C_6H_{14} dilihat dari hasil penelitian, terdapat perbedaan besar sudut, pada unsur karbon yang memiliki cabang, sudut ikatannya lebih kecil dari pada rantai lurus dan panjang ikatan pada cabang juga lebih jauh dari pada rantai lurus. Hal tersebut disebabkan oleh energi yang dihasilkan oleh rantai bercabang lebih besar karena adanya tolakan electron unsur-unsur pembentuk senyawa tersebut.

Struktur geometri juga mempengaruhi titik didih dan titik leleh tiap-tiap senyawa. Semakin besar panjang ikatan atau semakin kecil sudut ikatan pada suatu senyawa maka semakin mudah ikatan ikatan tersebut terputus (titik didih dan titik lelehnya lebih tinggi).

Data yang disajikan dalam tabel diatas adalah data hasil analisis isomer dari C_6H_{14} . Hasil menunjukkan bahwa energi yang dihasilkan pada heksana lebih kecil dari pada energi yang dihasilkan oleh isomer yang lain. Sedangkan energi yang paling besar dihasilkan pada struktur 2,2-dimetil butane.

Dilihat dari struktur geometri, sudut ikatan yang paling besar terdapat pada

heksana dan ikatannya lebih pendek dari struktur yang lainnya. Sedangkan sudut ikatan yang paling kecil terdapat pada senyawa 2,2 dimetil butane yang memiliki rantai isopropyl.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian ini dapat disimpulkan bahwa kestabilan suatu molekul dipengaruhi oleh besarnya energi yang dihasilkan dan bentuk geometri molekulnya. struktur yang stabil menghasilkan energi yang lebih kecil dibandingkan dengan struktur yang tidak stabil. Semakin stabil suatu molekul maka semakin tinggi titik didih dan titik lelehnya.

Dengan demikian isomer C_6H_{14} lebih stabil pada struktur heksana dengan energi yang dihasilkan -618439.278109 KJ/mol, MP -95°C, BP 68.7 °C, dan paling tidak stabil dalam struktur 2,2-dimetil butana dengan energi -613443.100345, MP -98 °C, BP 49.7 °C.

UCAPAN TERIMA KASIH

Terimakasih penulis ucapkan kepada Bapak Hasby, S.Pd., M.PKim yang telah yang telah meluangkan waktu untuk

membimbing penulis hingga akhirnya penelitian ini dapat terselesaikan..

DAFTAR PUSTAKA

Aziz, T. 2009. Pengaruh Pelarut Heksana Dan Etanol, Volume Pelarut, Dan Waktu Ekstraksi Terhadap Hasil Ekstraksi Minyak Kopi, *Jurnal Teknik Kimia*, 16 (1): 1-8

Hasby, Ledyastuti, M, dan Pamungkas, G. 2016. Pembelajaran Reaksi Isomerisasi HOCN-HNCO Melalui Studi Komputasi AB INITIO, 368-373

Muslim. 2017. Pengembangan Media Pembelajaran Bentuk Molekul Menggunakan Software Aurora 3d, *Jurnal Pembelajaran Kimia*, 6 (1): 55-64

Setyarini, M., Liliyasi., Kadarohman, A., dan Martoprawiro, M. A. 2017. Efektivitas Pembelajaran Stereokimia Berbasis Visualisasi 3d Molekul Untuk Meningkatkan Kemampuan Spasial, *Jurnal Cakrawala Pendidikan*, 36 (1): 91-101

Siregar, A. M., and Sinaga H. J. 2017. Studi Penentuan Semikonduktor Melalui Kajian Celah Energi Kompleks Senyawa Be-Porfirin Menggunakan Metode Komputasi Semiempiris Zindo/1, *Einstein E-Journal*, 5 (1): 13-16

Solomon T.W. Graham. 2009. *Organic Chemistry*. United States of America, John Willey