

PEMODELAN REAKSI HIDROGENASI SENYAWA HIDROKARBON GOLONGAN ALKENA DAN ALKUNA MELALUI STUDI KOMPUTASI

Irma Amalia*¹, Vinni Putri Ayu Dani², Vitri Tamala³, dan Musnaini⁴

^{1,2,3,4}Program Studi Pendidikan Kimia FKIP Universitas Samudra

Jln. Kampus Meurandeh, Langsa 24416

*Email: irmaamalia116@gmail.com

Abstrak

Hidrogenasi merupakan reaksi hidrogen dengan senyawa organik, reaksi ini terjadi dengan penambahan hidrogen secara langsung pada ikatan rangkap. Senyawa yang bisa dihidrogenasi adalah senyawa yang kurang jenuh yaitu golongan alkena dan alkuna. Reaksi ini termasuk reaksi eksotermik yaitu reaksi yang membebaskan panas. Panas yang dilepaskan tersebut dikenal dengan panas hidrogenasi atau energi hidrogenasi. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk membandingkan tingkat kemudahan senyawa hidrokarbon golongan alkena dan alkuna ketika dilakukan hidrogenasi, yang dilihat dari nilai panas hidrogenasinya. Studi komputasi ini menggunakan pendekatan teori DFT, fungsional B3LYP, dan basis set 3-21G. Dari hasil pengukuran menunjukkan bahwa, pada hidrogenasi alkena rantai lurus, panas hidrogenasi tidak ditentukan secara signifikan oleh panjang rantai tetapi oleh posisi ikatan rangkap sedangkan pada rantai bercabang, adanya penambahan cabang pada senyawa alkena akan menyebabkan panas hidrogenasi yang dilepaskan semakin kecil sehingga secara termodinamis semakin sulit berlangsung. Hal ini disebabkan kemungkinan adanya efek sterik (rintangan oleh gugus/cabang) yang terjadi pada rantai bercabang. Pada alkuna, panjang rantai tidak berpengaruh pada tingkat mudah atau tidaknya hidrogenasi berlangsung secara termodinamis.

Kata kunci: Hidrogenasi, alkena, alkuna, efek sterik

Abstract

Hydrogenation is the reaction of hydrogen with organic compounds, this reaction occurs by adding hydrogen directly to a double bond. The compounds that can be hydrogenated are the less saturated compounds, they are the alkene and alkyne group. These reactions include exothermic reactions, those that release heat. The heat released is known as hydrogenation heat or hydrogenation energy. The purpose of this study is to compare the ease of hydrocarbon compounds of the alkenes and alkenes when hydrogenated, as seen from the heat value of the hydrogenation. This computational study uses the DFT theory approach, B3LYP functional, and 3-21G basis set. From the measurement results show that, in the hydrogenation of straight chain alkene, the heat of hydrogenation is not significantly determined by the length of the chain but by the position of the double bond while in the branching chain, the addition of branches to the alkene compound will cause the hydrogenation heat to be released smaller and so thermodynamically more difficult take place. This is due to the possibility of steric effects (obstacles by clusters / branches) that occur in branching chains. In alkyne, the length of the chain has no effect on the degree to which hydrogenation takes place thermodynamically

Keywords: Hydrogenation, alkene, alkyne, stericobstacle

PENDAHULUAN

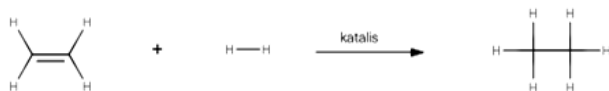
Kimia komputasi menunjukkan bahwa suatu sistem kimia dideskripsikan secara matematis menggunakan hukum-hukum fisika dan diselesaikan menggunakan komputer. Kimia

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

(Male, Sutapa, dan Ranglalin, 2015).

Pemodelan senyawa menggunakan metode komputasi *Density Functional Theory* (DFT). Metode ini dipilih karena dapat memodelkan sistem molekul dengan akurat dan memberikan data dalam tingkat mikroskopik yang berkorelasi signifikan dengan hasil eksperimen laboratorium (Wahyudah, 2016).

Hidrogenasi adalah reaksi yang terjadi antara molekul hidrogen (H_2) dengan senyawa kimia lain dimana berfungsi untuk memutus ikatan rangkap yang terdapat dalam senyawa tersebut. Semakin sedikit jumlah ikatan rangkap, akan semakin meningkatkan kestabilan senyawa (Alghifari dan Antika, 2016). Reaksi ini termasuk ke dalam reaksi adisi karena terjadi penambahan atom. Senyawa yang bisa dihidrogenasi adalah senyawa yang kurang jenuh (unsaturated) yaitu golongan alkena dan alkuna. Penambahan hidrogen ke dalam senyawa tersebut akan menambah tingkat kejenuhannya. (Nyoman Chandra, 2013)



Reaksi hidrogenasi tidak terlepas dari peran katalis. (Bustan dan Haryati, 2016). Reaksi hidrogenasi tidak akan berlangsung tanpa bantuan katalis. Secara termodinamika, reaksi ini lebih disukai karena reaksi ini akan membentuk produk yang lebih stabil. Dengan kata lain, energi produk lebih rendah dibandingkan dengan energi reaktannya.

Reaksi pembentukan melalui hidrogenasi bersifat eksotermik, artinya reaksi ini akan menghasilkan/

membebaskan panas (Saputro dan Akbar, 2017). Panas yang dilepaskan tersebut dikenal dengan Panas hidrogenasi atau energi hidrogenasi ($\Delta H_{\text{hidrogenasi}}$). Energi ini merupakan indikator yang menunjukkan tingkat mudah atau tidaknya hidrogenasi terjadi secara termodinamis. Panas atau energi hidrogenasi beberapa golongan alkena dan alkuna bisa diperbandingkan dengan menghitung panas hidrogenasi melalui data panas pembentukan, yaitu panas pembentukan produk (ΔH_f produk) dikurangi panas pembentukan reaktan (ΔH_f reaktan)

$$\Delta H_{\text{hidrogenasi}} = \Delta H_f \text{ produk} - \Delta H_f \text{ reaktan}$$

Reaktannya dalam hal ini adalah senyawa yang dihidrogenasi yaitu alkena atau alkuna dan gas hidrogen. Sedangkan produknya adalah hasil reaksi yaitu bisa alkana atau alkena. Dengan menganggap nilai panas pembentukan gas hidrogen adalah nol atau tetap, maka panas hidrogenasi bias dihitung dari panas pembentukan produk dan reaktan yang lain (Nyoman Chandra, 2013).

METODOLOGI

Penelitian ini menggunakan satu set komputer yang dilengkapi dengan program-program kimia yaitu Marvin sketch, Avogadro dan NwChem. Pengukuran dilakukan dengan perhitungan struktur stabil yang terlibat dalam reaksi hidrogenasi. Pada semua tingkat perhitungan dilakukan dengan metode komputasi melalui metode DFT, fungsional B3LYP dan menggunakan basis set 3-21G. *Software* yang digunakan dalam perhitungan komputasi yaitu Nwchem.

Pemodelan komputasi *a* dilakukan dalam 3 tahapan utama, yaitu penyiapan *input file*,

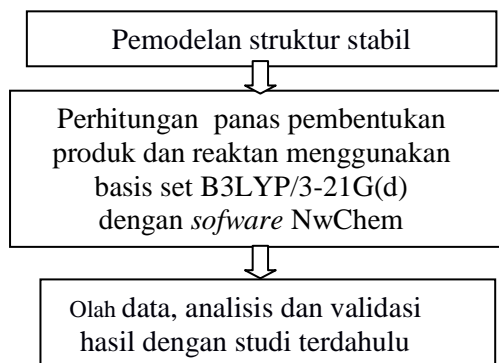
new job (proses perhitungan), dan analisis hasil komputasi. Secara lebih rinci akan dijelaskan sebagai berikut.

Pada **tahap penyiapan input file** dibutuhkan koordinat struktur. Penyiapan *input file* memanfaatkan aplikasi Avogadro. Pada reaksi hidrogenasi hidrokarbon perhitungan struktur yang paling stabil (reaktan dan produk) dilakukan dengan membuat struktur yang akan dihitung. Senyawa produk dan reaktan yang akan diukur panas pembentukannya di gambar bentuk tiga dimensinya menggunakan program Avogadro. Struktur tersebut kemudian dioptimasi dengan menggunakan perintah *Extensions - Optimize Geometry* sehingga menghasilkan struktur dengan energi yang paling rendah. Selanjutnya, dilakukan pengambilan input file dengan menggunakan perintah *Extensions - Nwchem* lalu dilakukan penyesuaian basis set yang digunakan.

Pada **tahap new job** dibutuhkan komputer untuk melakukan tahap ini. Selain komputer dibutuhkan juga *software* komputasi kuantum yaitu NwChem. *New job* adalah proses pengiriman *job* untuk melakukan optimasi geometri menggunakan *software* NwChem dalam melakukan perhitungan komputasi. *Software* Nwchem dapat melakukan proses perhitungan setelah perintah kerja dilakukan (contoh: untuk melakukan *new job*, pada *software* Nwchem klik *new job* kemudian ambil data struktur yang akan dihitung secara komputasi perintah yang terdapat pada *software* Nwchem yaitu *new job> file.nw >open>save*).

Pada **tahap analisis hasil komputasi (output file)** dibutuhkan

software visualisasi, yaitu Avogadro untuk memvisualisasikan struktur hasil komputasi. Dari output file, dilakukan perhitungan panas pembentukan produk dan reaktan sehingga dapat dihitung besar panas hidrogenasi dari reaksi tersebut.



Gambar 1. Diagram alir pemodelan struktur (Hasby dkk., 2016)

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hidrogenasi dengan mekanisme pemutusan ikatan rangkap tak jenuh C=C menjadi ikatan tunggal jenuh C-C dalam rantai molekul (Andriani dkk., 2018). Studi hidrogenasi yang dilakukan bertujuan untuk membandingkan tingkat kemudahan senyawa hidrokarbon golongan alkena dan alkuna ketika dilakukan hidrogenasi, yang dilihat dari nilai panas hidrogenasinya secara termodinamika. Kajian dilakukan dengan memvariasi panjang rantai dan bentuk rantai. Hasil pengukuran dan perhitungan panas pembentukan dan panas hidrogenasi bisa dilihat pada tabel yang dilampirkan.

Dari hasil yang didapatkan pada Tabel 1, Tabel 2 dan Tabel 3, nilai dari $\Delta H_{\text{hidrogenasi}}$ bernilai negatif (-) melalui basis set B3LYP/3-21G. Hasil ini menunjukkan bahwa reaksi berlangsung secara eksoterm dan energi pembentukan produk lebih rendah dibandingkan energi pembentukan

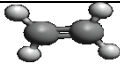
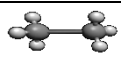
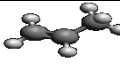
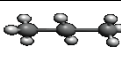
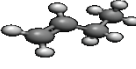
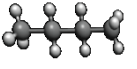
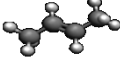
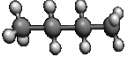
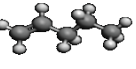
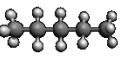
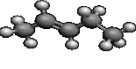
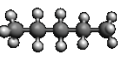
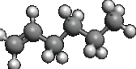
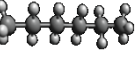
reaktan, maka selama reaksi berlangsung disertai dengan pelepasan kalor.

1. Hidrogenasi pada alkena rantai lurus

Pada Tabel 1. Dari hasil pengukuran

panas hidrogenasi terlihat pasangan senyawa 3-4 memiliki panjang rantai yang sama namun memiliki panas hidrogenasi

Tabel 1. Panas pembentukan dan Panas hidrogenasi beberapa golongan alkena rantai lurus

No	Reaktan	Panas pembentukan reaktan(kcal/mol)	Produk	Panas pembentukan produk (kcal/mol)	Panas hidrogenasi (kcal/mol)
1	 Etena	-48979,46	 Etana	-49725,72	-746,262
2	 Propena	-73480,23	 Propana	-74224,92	-744,686
3	 Butena	-97978,83	 Butana	-98724,05	-745,225
4	 2-butena	-97978,76	 Butana	-98724,05	-745,288
5	 Pentena	-122478,12	 Pentana	-123301,16	-823,04
6	 2-pentena	-122482,83	 Pentana	-123301,16	-818,325
7	 Heksena	-146.977,549	 Heksana	-147.722,882	-745,333

yang hampir sama. Berbeda dengan pasangan senyawa 5-6, di mana pasangan senyawa tersebut punya panjang rantai yang sama, tetapi panas hidrogenasinya berbeda. Sedangkan untuk pasangan senyawa nomor 4-7, pasangan tersebut punya panjang rantai berbeda, tetapi memiliki panas hidrogenasi yang hampir sama. Hal ini menunjukkan bahwa panas hidrogenasi secara termodinamik tidak ditentukan oleh panjang rantainya.

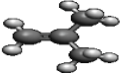
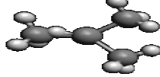
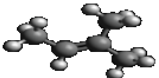
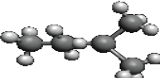
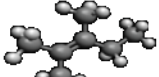
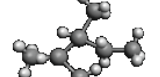
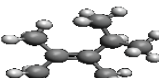
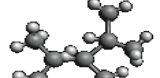
Posisi ikatan rangkap menjadi faktor yang paling berpengaruh terhadap panas hidrogenasi yang dihasilkan. Misalnya bisa dilihat pada pasangan senyawa no 3-4 dan 5-6. Posisi ikatan rangkap yang berada di ujung, cenderung tidak stabil sehingga senyawa tersebut mudah berubah menjadi produk.

Bentuk produk lebih disukai secara termodinamika dibandingkan bentuk reaktan. Pada senyawa nomor 1, posisi

ikatan rangkapnya berada di ujung, akan tetapi posisinya simetris yaitu sisi gugus sebelah kiri sama dengan sisi gugus sebelah kanan sehingga senyawa ini secara termodinamik lebih stabil dibandingkan senyawa lain yang memiliki ikatan rangkap di ujung. Pada pasangan senyawa 5-6 dapat dilihat dari tinjauan termodinamis di mana ikatan rangkap yang berada di ujung akan cenderung lebih tidak stabil dibandingkan senyawa dengan ikatan rangkap lebih ke tengah, yang

menyebabkan panas hidrogenasi yang dilepas lebih besar (lebih stabil), kita juga bisa mengkajinya dari tinjauan kinetis. Posisi ikatan di ujung memungkinkan tidak adanya rintangan sehingga memudahkan hidrogen untuk masuk. Di sini dapat dilihat bahwa faktor dari rintangan steriklah yang sangat berpengaruh dalam besarnya panas hidrogenasi

Tabel 2. Panas hidrogenasi alkena bercabang

No	Reaktan	Panas pembentukan reaktan(kcal/mol)	Produk	Panas pembentukan produk (kcal/mol)	Panas hidrogenasi (kcal/mol)
1	 2- Metil propena	-147051,28	 2- Metil propana	-147.997,40	-946,122
2	 2-Metil butena	-122485,90	 2-Metil butana	-123.224,59	-738,687
3	 2,3-Dimetil Pentena	-171493,69	 2-Dimetil Pentana	-172.222,86	-729,167
4	 2,3,4-Trimetil Pentena	-195983,36	 2,3,4-Trimetil Pentana	-196.635,89	-652,529

2. Hidrogenasi alkena rantai bercabang

Tabel 2 menunjukkan pengukuran dan perhitungan panas reaksi beberapa golongan alkena rantai bercabang. Beberapa senyawa divariasikan banyak cabang dan panjang rantainya untuk mengetahui faktor yang mempengaruhi panas hidrogenasi. Pada pasangan senyawa

nomor 4 dapat dilihat bahwa pasangan tersebut memiliki lebih banyak cabang dibandingkan senyawa lainnya. Dari hasil panas hidrogenasi yang didapatkan terlihat bahwa pasangan senyawa nomor 4 memiliki panas hidrogenasi lebih besar maka senyawa tersebut akan semakin meningkatkan kestabilannya. Hal ini


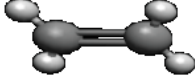
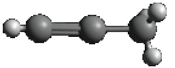
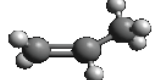
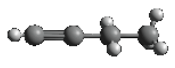
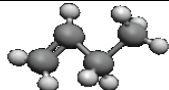
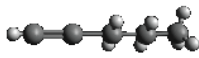
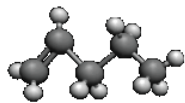
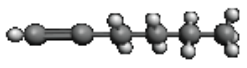
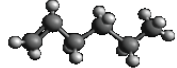
disebabkan oleh adanya rintangan sterik yang mengakibatkan unsur H sulit masuk.

Akan tetapi, kenaikan kestabilan lebih besar terjadi pada reaktan yaitu pada golongan alkena sehingga adanya lebih penambahan cabang akan menyebabkan panas hidrogenasi yang dilepaskan semakin kecil (produk dengan cabang banyak akan semakin kurang stabil dibanding dengan produk dengan cabang sedikit).

3. Hidrogenasi senyawa golongan alkuna

Pada bagian ini dikaji hidrogenasi senyawa golongan alkuna. Senyawa golongan alkuna bila dihidrogenasi akan menjadi senyawa golongan alkena. Panas pembentukan alkuna (reaktannya), panas pembentukan alkena (produknya) dan panas hidrogenasinya disajikan dalam tabel 3. Pada pasangan senyawa nomor 3-5 pasangan ini memiliki panjang rantai yang

Tabel 3. Panas hidrogenasi alkuna

No	Reaktan	Panas pembentukan reaktan(kcal/mol)	Produk	Panas pembentukan produk (kcal/mol)	Panas hidrogenasi (kcal/mol)
1	 Etuna	-48.223,18	 Etena	-48.979,46	-756,276
2	 Propuna	-72.720,21	 Propena	-73.480,23	-760,020
3	 Butuna	-97.223,59	 Butena	-97.978,83	-755,233
4	 Pentuna	-121.726,72	 Pentena	-122.478,12	-751,394
5	 Heksuna	-146.221,91	 Heksena	-146.977,55	-755,642

berbeda namun memiliki panas hidrogenasi yang hampir sama. Dari data tersebut dapat dilihat bahwa panjang rantai pada senyawa alkuna terhadap panas hidrogenasi yang

dilepaskan tidak berpengaruh secara signifikan. Lebih jelasnya dapat dilihat Dari pasangan nomor 1-5 yaitu hidrogenasi etuna dan heksuna yang memiliki panas

hidrogenasi tidak berbeda jauh. Pada senyawa 1-2 dapat dilihat bahwa bentuk alkenanya (produk) lebih stabil dibandingkan bentuk alkenanya. Dilihat berdasarkan panas pembentukan dari senyawa tersebut. Panas pembentukan produk lebih besar dibandingkan panas pembentukan senyawa lainnya.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa panas hidrogenasi yang dilepaskan hidrogenasi pada unsur alkena tidak dipengaruhi oleh panjang rantai ikatan tetapi pada posisi ikatan rangkap dari senyawa tersebut. Sedangkan penambahan cabang pada senyawa alkena menyebabkan panas hidrogenasi yang dilepaskan semakin kecil sehingga secara termodinamis reaksi semakin sulit berlangsung. Hal ini disebabkan adanya rintangan sterik yang menyebabkan H kesulitan masuk. Pada hidrogenasi alkuna panjang rantai tidak berpengaruh secara signifikan pada tingkat mudah tidaknya reaksi berlangsung.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Bapak Hasby, M.Pkim atas bimbingannya sehingga penelitian ini dapat terselesaikan. Penulis juga berterima kasih kepada tim atas kerjasamanya yang luar biasa demi terselesaikannya penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

Alghifari, M. I., dan Mega A. F. 2016. Sintesis Biodiesel Dari Minyak Kemiri Sunan Dengan Katalis Homogen Melalui Reaksi Esterifikasi Dan Transesterifikasi Secara Bertahap. *Seminar Nasional*

Sains dan Teknologi, 11.

Andriani, W., Puspitasari, S., Wydiantoro A. N Z., dan Muslich. 2018. Evaluasi Jenis Bahan Penstabil Dan Koagulan Lateks Pada Sistem Reaksi Hidrogenasi Katalitik Lateks Karet Alam Skala Semi Pilot. *Jurnal Penelitian Karet* 36 (1): 89–100.

Bustan, M. D., dan Haryati, S. 2016. Studi Pengaruh Ukuran Partikel Ruthenium Dalam Katalis Ru/Al₂O₃ pada Reaksi Hidrogenasi Karbon Monoksida. 22 (4): 8.

Hasby., Ledyastuti M., dan Pamungkas, G. 2016. Pembelajaran Reaksi Isomerisasi HOCN-HNCO Melalui Studi Komputasi *Ab Initio*. *Prosiding SNIPS*, 6.

Male, Y. T., Sutapa, I. W., dan Ranglalin, O. M. 2015. Studi Komputasi Zat Warna (Dyes) Alami sebagai Material Aktif pada Sel Surya Organik Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (Density Functional Theory, Dft). *Ind. J. Chem. Res* 2: 8

Nyoman, C. 2013. Studi Hidrogenasi Senyawa Hidrokarbon Golongan Alkena Dan Alkuna Secara Komputasi. *Jurnal FMIPA UNILA* 1 (1): 193–97.

Saputro., Gandaryus, A., dan Akbar, F. T. 2017. Reaksi Hidrogenasi Metoksida Menjadi Metanol Pada Kluster Pd₆Ni. *Journal of Science and Application Technology* 2 (1): 53–57.

Wahyudah, H., dan Sanjaya, I G. M. 2016.

Kajian Teoritis Kompleks
Aluminium-Delfinidin Sebagai
Bahan Dasar Fotosensor. *UNESA
Journal Of Chemistry* 5: 7.