

KARAKTERISTIK ASAM ORTO-iodohipurat BERDASARKAN PERHITUNGAN PPP- MO DAN MM

Muhyatun

Pusat Penelitian Teknik Nuklir - Badan Tenaga Atom Nasional

ABSTRAK

KARAKTERISTIK ASAM ORTO-iodohipurat BERDASARKAN PERHITUNGAN PPP- MO DAN MM. Telah dilakukan perhitungan PPP-MO (pariser parr pople molecular orbital) dan MM (mekanika molekul) pada asam orto-iodohipurat. Berdasarkan kedua perhitungan tersebut telah diperoleh susunan kerapatan elektron asam hipurat dan energi sterik asam orto-iodohipurat. Hasil perhitungan tersebut mengindikasikan bahwa lebih disukai posisi orto disebabkan karena efek muatan lebih berperan dibandingkan dengan efek sterik.

ABSTRACT

CHARACTERISTIC OF ORTHO IODOHIPURIC ACID BASED ON THE CALCULATION PPP- MO AND MM. The calculation of PPM-MO (pariser parr pople molecular orbital) and MM (molecular mechanic) on ortho iodohippuric acid have been conducted. Based on both calculations, the electron affinity of hippuric acid and the steric energy of ortho iodohippuric acid were obtained. The results indicated that the ortho position was preferred, it was due to the fact that the charge effect had a more significant contribution as compared to the steric one.

PENDAHULUAN

Penandaan asam orto-iodohipurat dengan Na^{131}I selalu terjadi pada posisi orto. Ditinjau dari struktur geometrinya, posisi orto mempunyai hambatan sterik yang paling besar dibandingkan dengan posisi meta ataupun para. Disamping efek sterik, pusat kereaktifan berperan penting dalam memberikan hasil akhir suatu sintesis. Sehingga pada makalah ini dilakukan perhitungan PPP untuk mengetahui distribusi kerapatan muatan dan perhitungan MM untuk memperkirakan besarnya efek sterik. Dari paduan kedua perhitungan tersebut akan ditinjau sejauh mana peran serta efek sterik dan distribusi kerapatan muatan dalam memberikan hasil akhir suatu sintesis.

TEORI

Metode perhitungan energi molekul berdasarkan teori Orbital Molekul LCAO-MO (linear combination of atomic orbitals molecular orbital) telah lama digunakan untuk memprediksi sifat molekul secara kuantitatif berbagai senyawa kimia. Metode perhitungan tersebut sangat bervariasi, mulai dari yang paling sederhana HMO (Hückel molecular orbital) sampai metode Abinitio sesuai dengan makin banyaknya pendekatan-pendekatan yang diterapkan. Pada perhitungan molekul yang bersifat

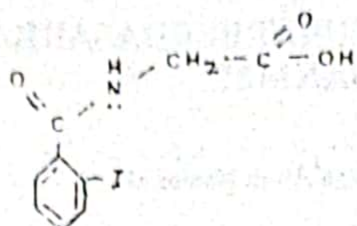
polar, dipilih metode perhitungan LCAO-MO yang memperhitungkan efek tolakan elektron. Karena pada molekul polar harga Integral Coulomb dan Integral Resonansi menjadi tidak konstan, sesuai dengan kerapatan muatan pada masing-masing atom dan ordo ikatannya.

Untuk molekul yang merupakan sistem terkonjugasi bisa diterapkan perhitungan LCAO-MO dengan sistem pendekatan elektron p, dan metode yang dapat dipakai adalah teknik ω , teknik ω lanjut dan metode PPP.

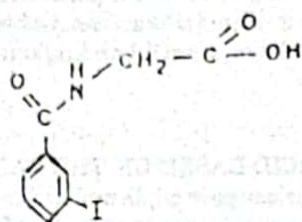
Hasil perhitungan energi molekul dengan metode PPP diharapkan akan lebih akurat, karena metode lainnya (ω dan ω lanjut) menurunkan penyederhanaan dari metode PPP. Dalam teknik ω lanjut perhitungan terhadap faktor tolakan elektron dari atom yang berbeda (ii,jj) dan dari atom yang sama (ii,ii) dihindarkan dan diganti dengan parameter ω' dan ω . Sedangkan pada teknik ω , faktor tolakan elektron dari atom yang berbeda (ii,jj) diabaikan.

HASIL DAN DISKUSI

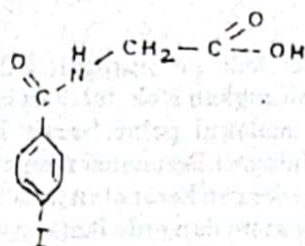
Perhitungan MM dilakukan pada ketiga posisi (Orto, Meta dan Para) dari senyawa asam orto iodohipurat dengan rumus molekul sebagai berikut:



Orto



Meta



Para

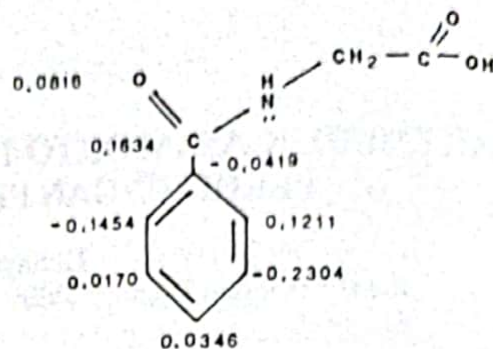
Pada perhitungan MM besarnya energi sterik dan rincian energinya untuk masing-masing senyawa Orto, Meta dan Para dapat dilihat pada Tabel 1.

Dari hasil perhitungan tersebut, posisi orto distabilisasi kira-kira 1,26 kkal/mol terhadap posisi meta dan 1,49 kkal/mol terhadap posisi para.

Hasil perhitungan PPP pada asam hipurat memberikan kerapatan elektron sebagai berikut :

DAFTAR PUSTAKA

1. Phillip Bawen, J. and Norman L. Allinger, Molecular Mechanics : Art and Sciences, Rev. Comp. Chem., 2(1992).
2. John Griffiths, Alfons G. Schermovler, PPP-MO, QCPE, Indiana University Departement of Chemistry.



Tabel 1. Energi - energi hasil perhitungan MM (kkal/mol)

Energi/posisi	Orto	Meta	Para
Ulur	0,08	0,13	0,12
Tekuk	1,79	2,55	2,37
Ulur-tekuk	0,03	0,05	0,04
Putar	11,39	8,16	8,55
van der Waals	7,15	8,04	8,04
elek	-15,51	-12,74	-12,71
Sterik	4,93	6,19	6,42

Posisi orto merupakan tempat yang paling reaktif terhadap serangan I. Perhitungan PPP dan MM memberikan hasil yang sama, di mana posisi orto merupakan tempat yang paling reaktif untuk serangan I. Walaupun posisi orto mempunyai halangan sterik yang paling besar dibandingkan kedua posisi yang lain, tetapi kerapatan elektron pada posisi orto merupakan tempat yang paling reaktif terhadap serangan I.

Untuk posisi meta dan para kedua perhitungan tersebut memberikan hasil yang berbeda, sehingga perlu dilakukan evaluasi dengan menggunakan metode perhitungan lain yang lebih sesuai. Hal tersebut akan dilakukan dan dibahas pada tulisan selanjutnya.

KESIMPULAN

Posisi orto mempunyai kerapatan elektron yang paling besar sehingga merupakan tempat yang strategis terhadap serangan I.

DISKUSI

Sunarhadiyoso :

Input data apa saja yang diperlukan untuk melaksanakan perhitungan PPP-MO dan MM masing-masing dan dalam bentuk apa sumber data input tersebut dapat diperoleh?

Muhayatun :

Untuk perhitungan PPP-MO input yang dimasukkan adalah affinitas elektron dan potensial ionisasi, adapun untuk perhitungan MM, input yang dimasukkan adalah panjang ikatan.