

Studi Ikatan Hidrogen Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol dengan Metode Molekular Dinamik

Rananda Vinsiah^{1,2}, Fadhillah¹
*e-mail: ranandavinsiah21@gmail.com

¹ Program Studi Kimia, Pascasarjana Universitas Sriwijaya

² SMA Negeri 3 Palembang, Sumatera Selatan

ABSTRACT

The purpose of this research are to know about how Hydrogen Bond of methanol-methanol system and ethanol-ethanol system can be established and to know about the characters of both. The device of thi research use a set of computer which has been installed HyperChem 8.0 program for Windows 7. This program is used to determined the length, the angle of bond, and the torque bond of Hydrogen Bond in both of the systems until the minimum energy point was be founded. Based on the observation result data, for methanol-methanol system are obtained 2,3 Å for the length and the energy is about 1,8414 kkal/mol, 112,4 θ for the angle bond and the energy is about 9.46454 kkal/mol, and 338,5 φ for the angle torsion and the energy is about 9.453914 kkal/mol. And for ethanol-ethanol system are obtained 2,8 Å for the length and the energy is about 455.941282 kkal/mol, 121.9 θ for the angle bond and the energy is about 455.979291 kkal/mol, and 261.7 φ for the angle torsion and the energy is about 455.977901 kkal/mol.

Keyword : hydrogen bond, molecule, radius, angle bond, torsion bond, minimum energy

ABSTRAK

Penelitian dilakukan dengan tujuan untuk mengetahui model persamaan ikatan hidrogen yang terjadi antara methanol-metanol dan antara etanol-etanol sehingga bisa diketahui sifat-sifatnya. Perangkat yang digunakan adalah perangkat komputer dengan aplikasi program HyperChem 8.0 for Windows 7. Program tersebut digunakan untuk menentukan panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut torsi yang terbentuk pada ikatan hidrogen di kedua molekul hingga titik energi minimum ditemukan. Berdasarkan data hasil pengamatan, untuk sistem metanol-metanol didapatkan panjang ikatan hidrogen sebesar 2,3 Å dengan energi sebesar 1,8414 kkal/mol, sudut ikatan sebesar 112,4 θ dengan energi sebesar 9.46454 kkal/mol, dan sudut torsi sebesar 338,5 φ dengan energi sebesar 9.453914 kkal/mol. Sedangkan untuk sistem etanol-etanol didapatkan panjang ikatan hidrogen sebesar 2,8 Å dengan energi sebesar 455.941282 kkal/mol, sudut ikatan sebesar 121.9 θ dengan energi sebesar 455.979291 kkal/mol, dan sudut torsi sebesar 261.7 φ dengan energi sebesar 455.977901 kkal/mol.

Kata Kunci : ikatan hidrogen, molekul, jari-jari, sudut ikatan, torsi ikatan, energi minimum

PENDAHULUAN

Ikatan kimia dan gaya antar molekul merupakan ilmu kimia yang mempelajari tentang bagaimana suatu atom dapat berikatan dan berinteraksi dengan atom lain. Gaya antar molekul adalah gaya elektromagnetik yang terjadi antar molekul atau antar bagian yang terpisah jauh dari suatu makromolekul. Dengan adanya gaya antar molekul tersebut dapat mempengaruhi sifat fisika dan kimia dari suatu senyawa. Fenomena gaya antar molekul tidak dapat dijangkau oleh panca indera tanpa atau dengan menggunakan instrumen. Fenomena gaya antarmolekul yang terjadi antar partikel penyusun zat berpengaruh terhadap sifat fisik dan sifat kimia zat tersebut. (Eckberg, Zemmer, Reeves, & Ward, 1994; Nyasulu & Macklin, 2006; Moore & Victorsen, 2007).

Salah satu sifat fisika senyawa yang di pengaruhi oleh gaya antarmolekul adalah fase senyawa yang berbentuk padat, cair maupun gas. Fenomena yang direpresentasikan pada tingkat mikroskopik yang berpengaruh terhadap sifat kimia zat adalah ikatan hidrogen intra- dan antar molekul (Muchson, Muhammad, 2013). Beberapa contoh ikatan lainnya yang juga terkait diantaranya adalah ikatan ion dan ikatan kovalen. Namun dari kedua ikatan tersebut, ikatan yang sangat umum dijumpai dalam kehidupan sehari-hari adalah ikatan hidrogen (termasuk ikatan kovalen). Salah satu contoh senyawa yang dipengaruhi oleh adanya ikatan hidrogen adalah etanol dan metanol

Ikatan hidrogen adalah ikatan yang terjadi antar atom hidrogen pada molekul yang satu dengan salah satu unsur (N,O,F) pada molekul yang lainnya yang merupakan gaya dipol-dipol yang paling kuat (Effendy, 2006). Selain itu menurut Prananto (2013), ikatan hidrogen digambarkan sebagai suatu bentuk interaksi elektrostatis antara atom

hidrogen yang terikat pada atom-atom elektronegatif dengan atom elektronegatif lainnya. Sedangkan menurut Kurniawan dan Nur (2005), pada ikatan hidrogen terdapat karakteristik proton penyusun atomnya, yaitu gerakan-gerakan dinamis proton dalam ikatan. Ikatan hidrogen yang terjadi antar molekul ini umumnya berbentuk interaksi dengan gambar putus-putus yang sulit diamati dengan mata telanjang. Hal ini dikarenakan ikatan tersebut termasuk dalam kajian mikroskopik.

Ikatan hidrogen ini memiliki peranan penting pada penentuan struktur, sifat, dan fungsi suatu molekul. Hal ini sejalan dengan apa yang disebutkan oleh Karna Wijaya (2003) yang mengatakan bahwa ikatan hidrogen merupakan ikatan yang berperan penting dalam penentuan struktur dan aktivitas biologi, *selforganization*, di dalam ilmu bahan, ilmu fisika, dan ilmu kimia. Dewasa ini seiring dengan makin berkembangnya teknologi, ilmu kimia tidak lagi diidentikkan dengan riset laboratorium. Hal ini ditunjukkan dengan sudah mulai banyaknya peneliti kimia yang melakukan riset dengan menggunakan komputer. Para peneliti tersebut umumnya mengkaji ilmu kimia secara teoritis dengan menggunakan eksperimen komputer (komputasi kimia).

Adanya komputasi kimia ini diharapkan dapat menjadi sarana yang dapat menghubungkan antara ilmu kimia teori dengan eksperimen laboratorium. Salah satu contohnya adalah program komputasi ikatan hidrogen untuk mengkaji ikatan hidrogen secara teoritis dengan bantuan *software*. Studi tentang ikatan hidrogen pun telah dilakukan secara intensif, mulai dari beberapa tipe ikatan hidrogen yang berperan dalam aktivitas molekul biologi hingga eksplorasi ikatan hidrogen lebih lanjut berkaitan dengan kekuatan ikatan, geometri bahkan arah ikatan terhadap suatu molekul.

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk membuat model persamaan ikatan hidrogen sistem Metanol-Metanol dan sistem Etanol-Etanol sehingga dapat diketahui sifat-sifat fisik dan kimianya berdasarkan energi terendah yang diperoleh.

METODE PENELITIAN

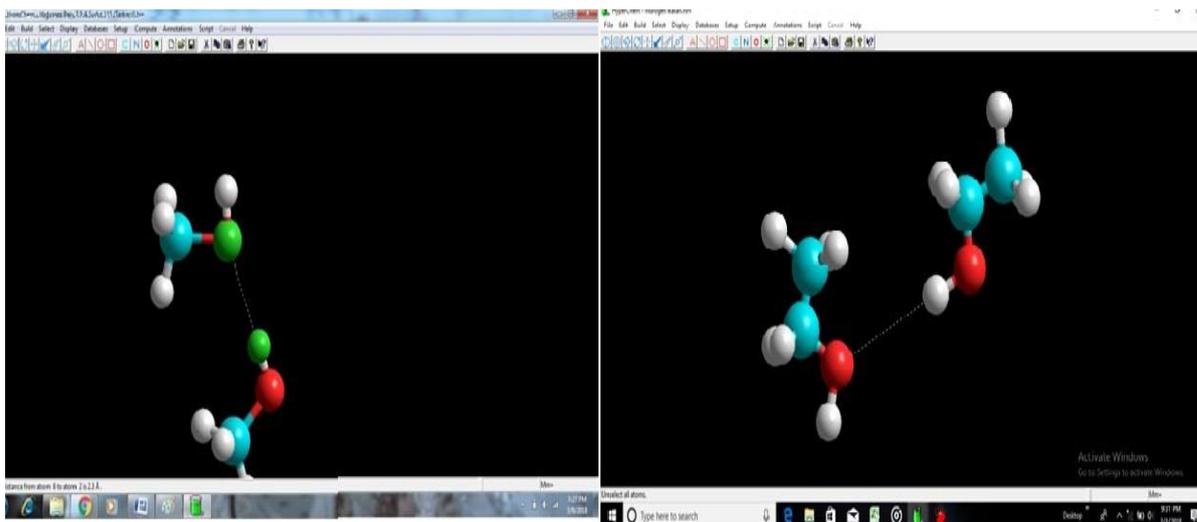
Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi Intel Celeron CPU 2,2 GHz, *hard disk* 500 GB, memory 2 GB RAM dengan sistem operasi *Windows 7 Ultimate* untuk operasi program dan penulisan laporan. Sedangkan program yang digunakan adalah aplikasi *Hyper Chem* versi *8.0forWindows 7*. Berdasarkan prosedur yang telah dibuat, langkah awal penelitian ini dilakukan dengan membuat atau menggambar kedua molekul terlebih dahulu dan dirancang agar ikatan hidrogennya terbentuk. Setelah ikatan terbentuk, dilakukan perhitungan jarak ikatan hydrogen (\AA), sudut (θ) dan torsi (φ) antar molekul yang bertujuan untuk memperoleh energy minimum dari ketiga pengukuran tersebut. Kemudian dilanjutkan dengan mengolah data dengan menggunakan *Microsoft Excel* untuk mendapatkan kurva energi.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Berdasarkan data hitung energi yang didapat dari pengoperasian aplikasi *HyperChem8.0* maka didapatkan data untuk ikatan hidrogen dengan energi terkecil untuk sistem Metanol-Metanol adalah sebesar $2,3 \text{ \AA}$ dengan besar energi sebesar $1,8414 \text{ kkal/mol}$ dan pada sistem Etanol-Etanol ikatan hidrogen sebesar $2,8 \text{ \AA}$ dengan besar energy $455.941282 \text{ kkal/mol}$.

Dari data tersebut dapat dilihat bahwa terdapat perbedaan panjang ikatan hidrogen yang terjadi antar dua molekul tersebut. Pada sistem Metanol-Metanol panjang ikatan hidrogen yang diperoleh lebih kecil dibandingkan dengan pada sistem Etanol-Etanol. Hal ini dapat terjadi karena adanya perbedaan ukuran molekul dan berat molekul diantara keduanya, dimana metanol memiliki berat molekul yang lebih kecil daripada etanol. Struktur senyawa etanol hampir mirip dengan senyawa metanol akan tetapi pada senyawa etanol terdapat penambahan panjang ikatan akibat adanya penambahan satu atom C sekunder. Hal ini sejalan dengan apa yang disebutkan oleh Tahir, I., Wijaya, K dan Yahya, M. Utoro (2002) menyatakan bahwa rantai suatu senyawa akan bertambah panjang jika terjadi atom C sekundernya bertambah sehingga dalam satu deret homolog berat molekulnya akan bertambah maka estimasi titik leleh (K) senyawa akan bertambah dan adanya ikatan hidrogen yang terbentuk menyebabkan terjadinya kenaikan titik leleh senyawa organik.

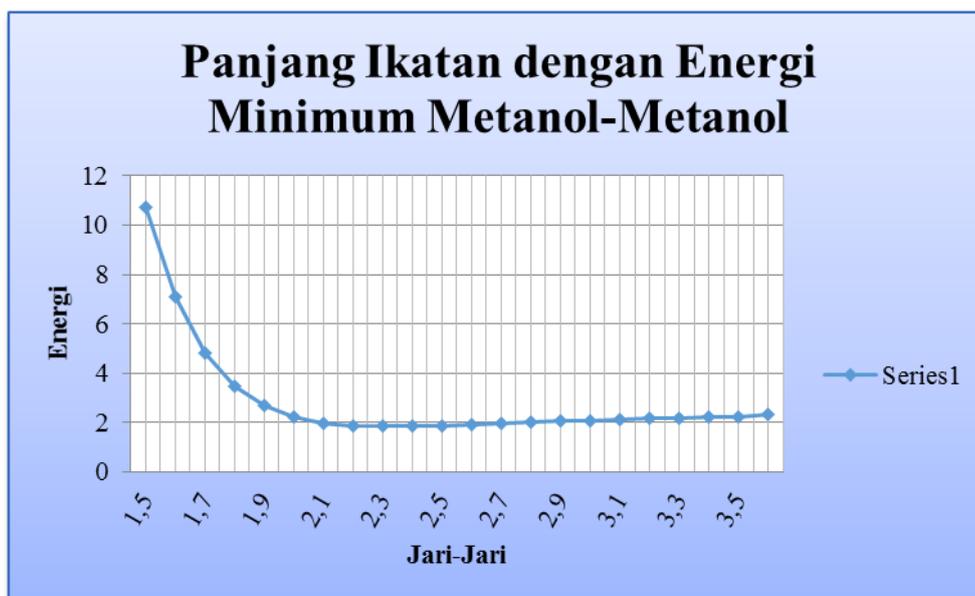
Munurut Santoso A (1999) menyatakan bahwa adanya ikatan hidrogen antarmolekul yang terbentuk akibat adanya gaya elektrostatik antara dipol-dipol menyebabkan kenaikan titik didih suatu senyawa. Titik didih metanol berada pada suhu $64,7^{\circ}\text{C}$ (Utomo, D.P., 2011), sedangkan titik didih etanol sebesar 78°C (Malle, D., Kapelle, I.B.D dan Lopulalan, F. 2014). hal ini menunjukkan jika panjang ikatan hidrogen pada sistem metanol dan sistem etanol berbeda. Menurut Hoffmann, M.M dan Conradi, M.S, (1998), ketergantungan suhu data, diekstrapolasikan pada kerapatan cairan seperti konstanta dan besarnya ikatan hidrogen masing-masing $12,8 \text{ kJ/mol}$ dan $16,8 \text{ kJ/mol}$ dalam metanol dan etanol.

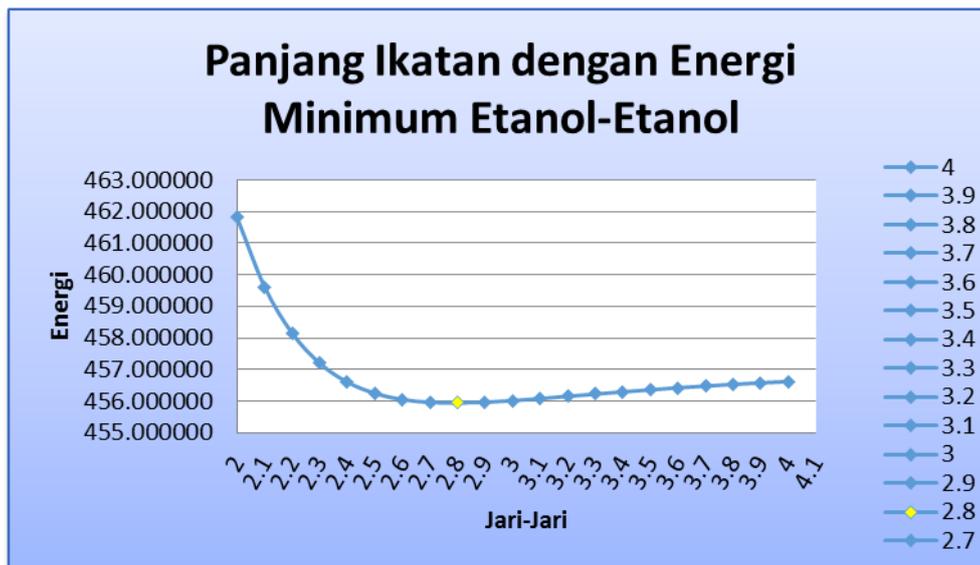


Gambar 1. Jari-jari ikatan hidrogen pada molekul metanol-metanol pada panjang ikatan 2.3 Å dan etanol-etanol pada panjang ikatan 2.8 Å

Sistem Metanol-Metanol		Sistem Etanol-Etanol	
Jari-jari (r)(Å)	Energi (E)	Jari-jari (r)(Å)	Energi (E)
2,0	2.2247	3.1	456.080461
2,1	1.9871	3	456.016034
2,2	1.8768	2.9	455.965713
2,3	1.8414	2.8	455.941282
2,4	1.8483	2.7	455.960281
2,5	1.8779	2.6	456.048520
2,6	1.9183	2.5	456.243625

Tabel 1. Jari-Jari Ikatan dan Energi pada Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol





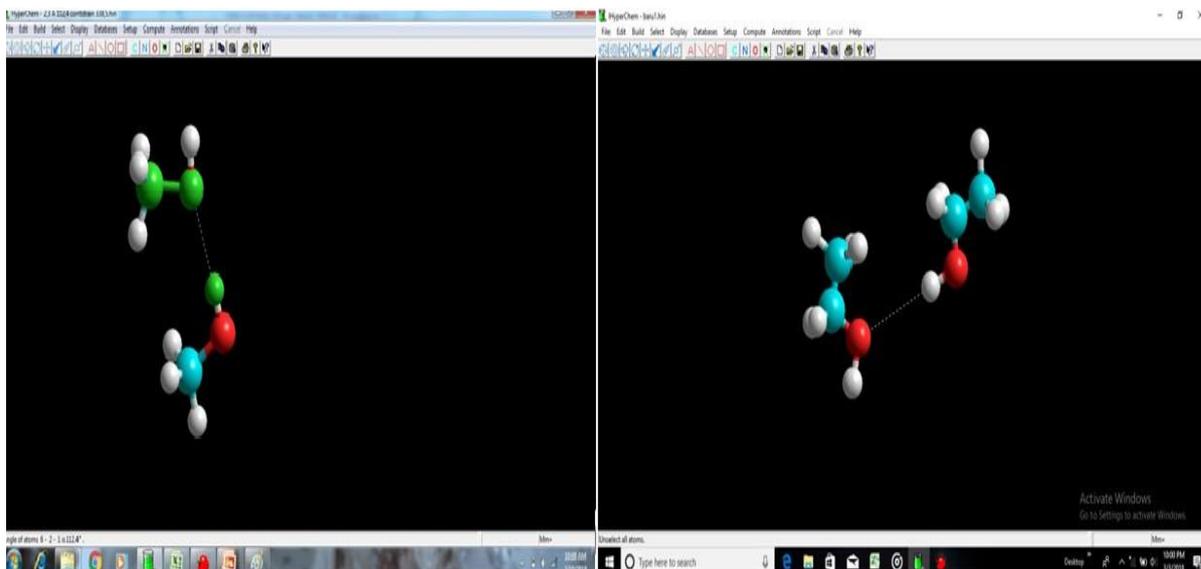
Grafik 1. Hubungan Panjang Ikatan dengan Energi Minimum pada Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol

Selanjutnya setelah didapatkan ikatan hidrogen dengan besar energi minimum pada kedua sistem, ikatan hidrogen tersebut di-*constrain* agar tidak terjadi perubahan signifikan saat menghitung sudut ikatan. Hal ini perlu dilakukan agar tidak terjadi pergeseran atau perubahan data yang menyebabkan data awal menjadi hilang. Selain itu juga untuk menjaga agar panjang ikatan tetap konstan saat dilakukan pergeseran.

Setelah melalui perhitungan dengan menggunakan program pada kedua sistem yang dibahas, untuk sudut ikatan pada sistem Metanol-metanol dengan energi minimum sebesar 9,46454 kkal/mol diperoleh sudut ikatan sebesar 112,4°. Sedangkan, untuk sudut ikatan pada sistem Etanol-etanol dengan energi minimum sebesar 455,929792 kkal/mol terjadi pada sudut 121,9°. Menurut Prananto, Y. Ponco (2013) bahwa perbedaan sudut ikatan yang terbentuk dikarenakan secara umum banyak ikatan hidrogen yang terbentuk mengalami penyimpangan terhadap linearitasnya dan perpindahan sudut D-H---A karena pengaruh faktor *conical correction*.

Pada saat terjadinya interaksi dengan akseptor pembentukan ikatan

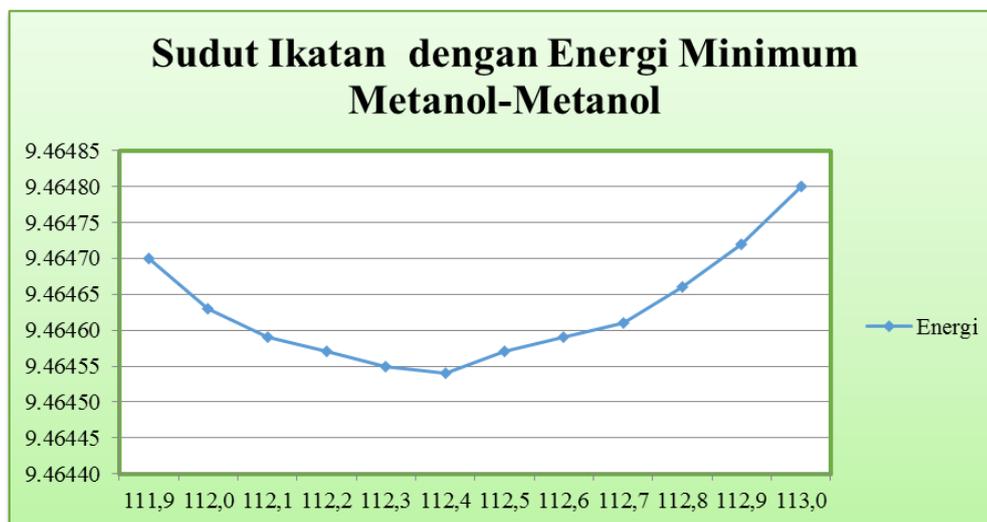
hydrogen yang linier membutuhkan kedudukan posisi yang tetap (*fixed*). Sedangkan kemungkinan posisi kedudukan ikatan hidrogen yang non-linier terkadang membentuk seperti kerucut di sekitar area interaksi linear yang terjadi. Adanya kerucut yang memiliki ukuran yang lebih besar akan berpengaruh terhadap besarnya sudut ikatan. Hal ini menyebabkan terbentuknya interaksi yang berpeluang menyebabkan terjadinya pembentukan ikatan hidrogen. Ikatan hidrogen yang memiliki poros yang tidak linier menyebabkan terjadinya pemutusan ikatan karena jenis ikatannya berada pada kriteria ikatan yang lemah.

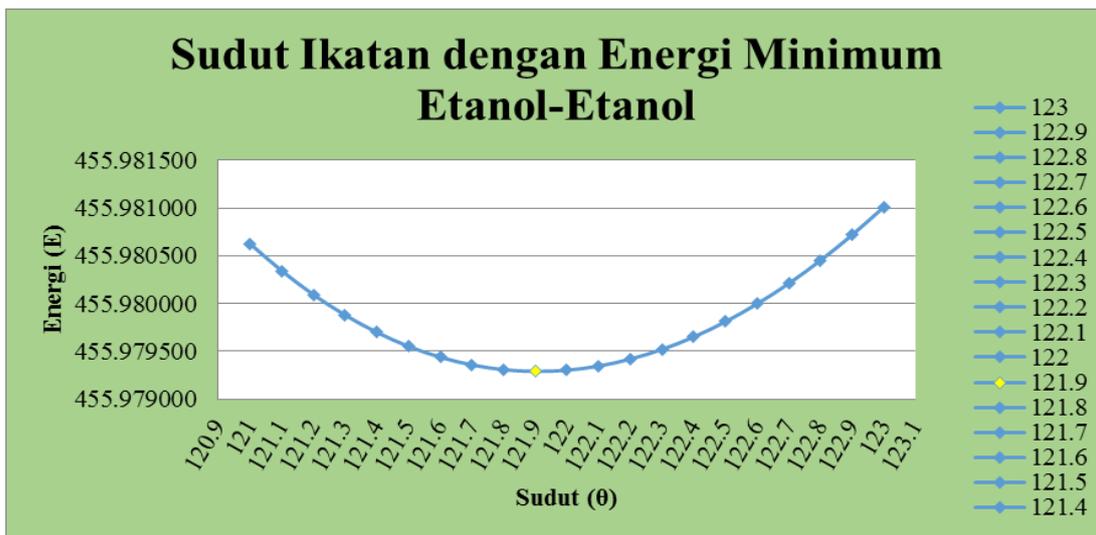


Gambar 2. Sudut ikatan hidrogen pada molekul metanol-metanol pada sudut ikatan 112,4° dan etanol-etanol pada sudut ikatan 121,9°

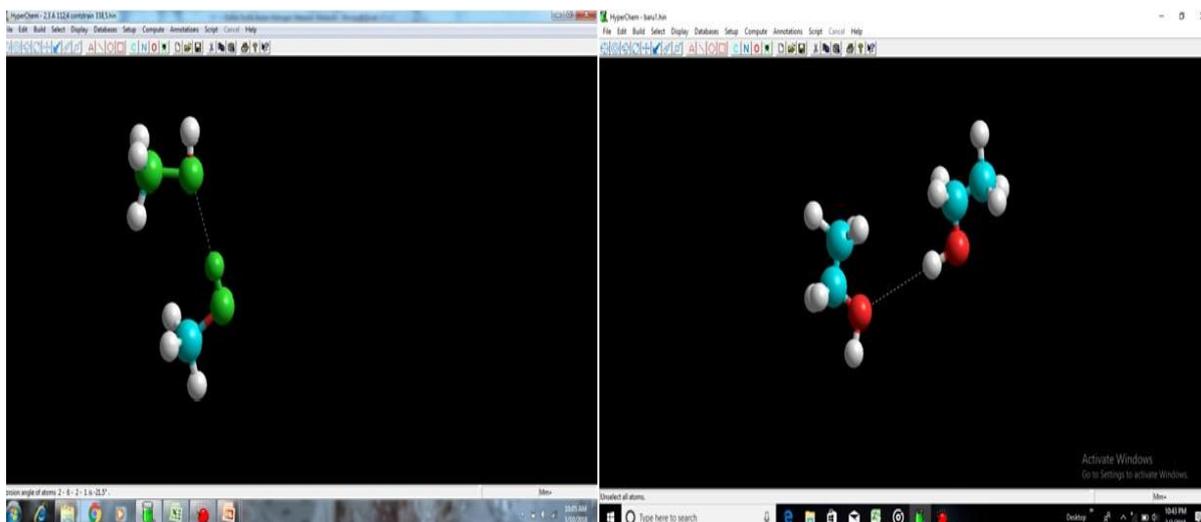
Sistem Metanol-Metanol		Sistem Etanol-Etanol	
Sudut (θ)	Energi (E)	Sudut (θ)	Energi (E)
112,1	9.46459	122.2	455.97942
112,2	9.46457	122.1	455.979347
112,3	9.46455	122	455.979304
112,4	9.46454	121.9	455.979291
112,5	9.46457	121.8	455.979309
112,6	9.46459	121.7	455.979359
112,7	9.46461	121.6	455.97944

Tabel 2. Hubungan Sudut Ikatan dengan Energi Minimum pada Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol





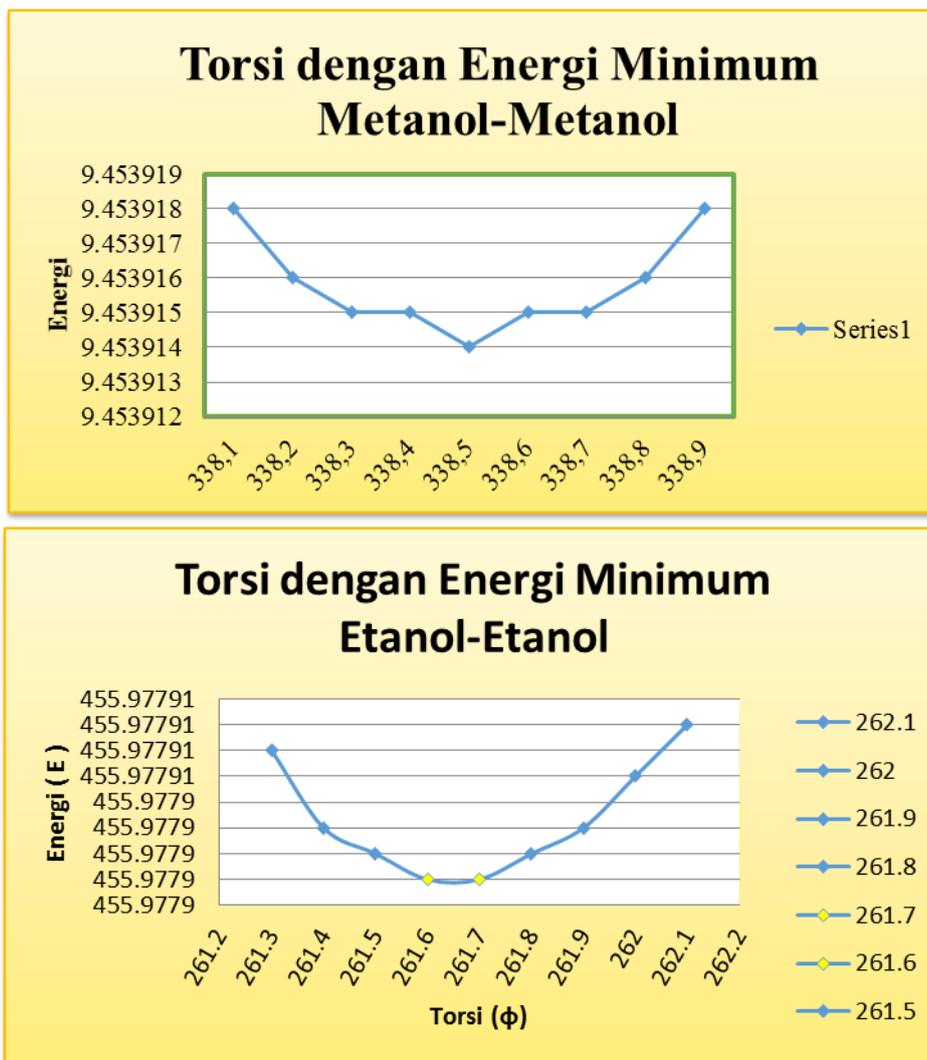
Grafik 2. Hubungan Sudut Ikatan dengan Energi Minimum pada Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol



Gambar 3. Sudut torsi ikatan hidrogen pada molekul metanol-metanol pada sudut torsi 338,5° dan etanol-etanol pada sudut torsi 261,7° dan 261,8°

Sistem Metanol-Metanol		Sistem Etanol-Etanol	
Torsi (φ)	Energi	Torsi (φ)	Energi (E)
338,1	9.453918	262.1	455.977907
338,2	9.453916	262	455.977905
338,3	9.453915	261.9	455.977903
338,4	9.453915	261.8	455.977902
338,5	9.453914	261.7	455.977901
338,6	9.453915	261.6	455.977901
338,7	9.453915	261.5	455.977902
338,8	9.453916	261.4	455.977903
338,9	9.453918	261.3	455.977906

Tabel 3. Hubungan Sudut Torsi dengan Energi Minimum pada Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol



Grafik 3. Hubungan Sudut Torsi dengan Energi Minimum pada Sistem Metanol-Metanol dan Etanol-Etanol

Selanjutnya setelah didapatkan panjang ikatan dan sudut ikatan dengan energi minimum, dilakukan variasi torsi dengan menjadikan salah satu dari kedua molekul pada sistem menjadi bidang atau titik tumpu terjadinya perputaran molekul. Berdasarkan titik tumpu ini, molekul yang lainnya akan dapat berputar hingga sudut 360° sesuai titik tumpu pada ikatan O-H pada molekul pertama. Dari hasil variasi berputaran molekul ini diperoleh bahwa energi minimum dari sistem metanol-metanol terhadap faktor sudut torsi ikatan hidrogen adalah sebesar 9.453914 kkal/mol yang terjadi pada torsi sebesar 338,5 (φ). Sedangkan pada sistem etanol-etanol sudut torsi ikatan yakni

sebesar 261.7(φ) dengan energi minimum sebesar 455.977901 kkal/mol.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil uji pada *HyperChem 8,0* yang telah dilakukan pada sistem metanol-metanol dan pada sistem etanol-etanol berturut-turut untuk panjang ikatan hidrogen yang terbentuk didapatkan panjang ikatan sebesar 2,3 Å dan sebesar 2,8 Å dengan energi minimum sebesar 1,8414 kkal/mol dan sebesar 455.941282 kkal/mol. Selanjutnya untuk sudut ikatan pada kedua sistem didapatkan sudut masing-masing sebesar 112,4° pada metanol-

metanol dan 121,9° pada etanol-etanol dengan energi minimum berturut-turut sebesar 9,46454 kkal/mol dan 455,929792 kkal/mol. Sedangkan untuk sudut torsi yang didapatkan berturut-turut pada methanol-metabol dan etanol-etanol, yakni torsi sebesar 338,5 (φ) dengan energi minimum sebesar 9.453914kkal/mol dan torsi sebesar 261.7(φ) dengan energi minimum sebesar 455.977901 kkal/mol.

DAFTAR PUSTAKA

Aman, Susanto. 1999. *Pengaruh Ikatan Hydrogen Terhadap Titik Didih dan, Titik Leleh dan Kelarutan Senyawa*. Journal.um.ac.id. Vol. 28, No 1(1999).

Eckberg, C.; Zemmer, J.; Reeves, J.; & Ward, C. 1994. *An Intermolecular Forces Study using IBM PSL*. Journal of Chemical Education. 71(9):A225-A237

Effendy. 2006. *Teori VSEPR Kepolaran, dan Gaya Antarmolekul*. Bayumedia Publishing. Malang.

Hoffmann, M.M dan Conradi, M.S. 1998. *Are There Hydrogen Bonds in Supercritical Methanol and Etanol*. J. Phys. Chem. B, 1998, 102 (1), pp 263–271

Kurniawan dan Nur. 2005. *Studi Pemodelan Dinamika Proton Dalam Ikatan Hidrogen H₂O Padatan Satu Dimensi*. Jurnal Berkala Fisika Vol. 8 No.3 Hal. 107-117

Malle, D., Kapelle, I.B.D dan Lopulalan, F. 2014. *Pembuatan Bioetanol dari Limbah Air Kelapa Melalui Proses Fermentasi*. Ind. J. Chem. Res., 2014. 2. 155-159

Muchson, Muhammad. 2013. *Pengembangan Multimedia*

Pembelajaran Interaktif Topik Gaya Antarmolekul pada Matakuliah Ikatan Kimia. Universitas Negeri Malang. Malang.

Pranoto. 2013. *Ikatan Hidrogen*. Malang : Universitas Brawijaya

Tahir, I., Wijaya, K dan Yahya, M. Utoro. 2002. *Hubungan Kuantitatif Antar Struktur Molekul dan Titik Leleh dari Berbagai Senyawa Organik*. Indonesia Journal of Chemistry. 2002. 2(2), 83-90.

Utomo, D.P., 2011. *Analisis Matematis dan Ekonomis Penggunaan Metanol dan Etanol pada Komppor "HD"*. Jurnal Teknik Industri. Vol. 11. No.1 Februari 2011 : 50-55.

Wijaya, Karna, dkk. 2003. *Studi Mekanisme Migrasi Proton Ganda Pada Struktur Supramolekul Asam Asetat-Air dan Asam Asetat-Ammoniak dengan Metode Ab Initio*. Indonesian Journal Of Chemistry. Vol. 3 (2) Hal. 102-110