

RINGKASAN

PENGARUH SUBSTITUEN NITRO PADA SINTESIS
N-(4-NITROBENZOIL)TIOUREA

Vivi Yolanda

Reaksi antara asil klorida dengan amina merupakan reaksi substitusi nukleofilik. Salah satu faktor yang mempengaruhi reaksi antara asil klorida dengan amina adalah substituen pada cincin benzena. Substituen pada cincin benzena akan mempengaruhi kereaktifan atom C karbonil. Adanya gugus nitro pada posisi *para* mempengaruhi kereaktifan senyawa melalui efek induktif sehingga berpengaruh terhadap persentase hasil reaksi. Pada penelitian ini disintesis senyawa N-benzoiltiourea dari bahan awal benzoil klorida dan N-(4-nitrobenzoil)tiourea dari bahan awal 4-nitrobenzoil klorida. Penelitian ini dilakukan dengan metode dan kondisi yang sama untuk mengetahui perbandingan persentase hasil reaksi tersebut, sehingga dapat diketahui pengaruh gugus nitro terhadap sintesis N-(4-nitrobenzoil)tiourea.

Senyawa N-benzoiltiourea disintesis dengan cara mereaksikan benzoil klorida dan tiourea dengan cara dipanaskan selama 3 jam pada suhu 85 - 90°C dalam pelarut toluena. Hasil sintesis N-benzoiltiourea berupa kristal jarum berwarna kuning muda dengan rata - rata persentase hasil 35.77 %. Hasil sintesis diidentifikasi menggunakan uji kromatografi lapis tipis, spektrofotometri UV, spektrofotometri IR, spektroskopi ¹H-RMI, dan spektrometri massa.

Berdasarkan data uji kromatografi lapis tipis senyawa N-benzoiltiourea pada berbagai eluen menunjukkan bahwa senyawa hasil sintesis murni secara kromatografi. Pada identifikasi dengan spektrofotometri UV dari N-benzoiltiourea diperoleh spektrum yang memiliki 2 puncak gelombang pada panjang gelombang 235.6 nm dan 281 nm. Berdasarkan identifikasi dengan spektrofotometri IR, senyawa N-benzoiltiourea memberikan serapan pada 1682 cm⁻¹ untuk -C=O amida, 3308 dan 3255 cm⁻¹ untuk -NH₂, 3159 cm⁻¹ untuk -NH- dan pada 700 - 750 cm⁻¹ untuk -C=C- cincin aromatis monosubstitusi. Berdasarkan identifikasi dengan spektroskopi ¹H-RMI, senyawa N-benzoiltiourea memberikan serapan multiplet pada geseran kimia 7.25 - 7.91 ppm untuk atom H dari cincin aromatis monosubstitusi, singlet pada geseran kimia 9.2 ppm untuk atom H dari -NH₂, dan singlet pada geseran kimia 10 ppm untuk atom H dari -NH-. Identifikasi secara spektrometri massa menunjukkan fragmen (C₆H₅-CONH₂)⁺ dengan m/e = 121, (C₆H₅-CO)⁺ dengan m/e = 105, dan (C₆H₆)⁺ dengan m/e = 77.

Senyawa N-(4-nitrobenzoil)tiourea disintesis dengan cara mereaksikan 4-nitrobenzoil klorida dan tiourea dengan cara dipanaskan selama 3 jam pada suhu 85 - 90°C dalam pelarut toluena. Hasil sintesis N-(4-nitrobenzoil)tiourea berupa kristal amorf berwarna kuning dengan rata - rata persentase hasil 16.63 %. Hasil sintesis diidentifikasi menggunakan uji kromatografi lapis tipis, spektrofotometri UV, spektrofotometri IR, spektroskopi ¹H-RMI, dan spektrometri massa.

Berdasarkan data dari hasil uji kromatografi lapis tipis senyawa N-(4-nitrobenzoil)tiourea pada berbagai eluen menunjukkan bahwa senyawa hasil sintesis murni secara kromatografi. Pada identifikasi dengan spektrofotometri UV dari N-(4-nitrobenzoil)tiourea diperoleh spektrum yang memiliki 1 puncak gelombang pada panjang gelombang 257 nm. Berdasarkan identifikasi dengan spektrofotometri IR, senyawa N-(4-nitrobenzoil)tiourea memberikan serapan pada 1691 cm^{-1} untuk -C=O amida, 3391 dan 3267 cm^{-1} untuk -NH_2 , 3161 cm^{-1} untuk -NH- dan pada $800 - 850\text{ cm}^{-1}$ untuk -C=C- cincin aromatis disubstitusi posisi *para*. Berdasarkan identifikasi dengan spektroskopi $^1\text{H-RMI}$, senyawa N-(4-nitrobenzoil)tiourea memberikan serapan doublet pada geseran kimia 8.382 ppm dengan tetapan kopling 8.82 Hz untuk atom H dari cincin aromatis disubstitusi posisi *para* yang dekat pada substituen penarik elektron dan doublet pada geseran kimia 8.035 ppm dengan tetapan kopling 8.82 Hz untuk atom H dari cincin aromatis disubstitusi yang jauh dan kurang terpengaruh oleh substituen penarik elektron. Identifikasi secara spektrometri massa menunjukkan fragmen $(\text{NO}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-CONH}_2)^+$ dengan $m/e = 166$ dan $(\text{NO}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-CO})^+$ dengan $m/e = 150$.

Dari sintesis yang telah dilakukan diperoleh rata - rata persentase hasil N-benzoiltiourea sebesar 35.77% sedangkan N-(4-nitrobenzoil)tiourea sebesar 16.63% . Persentase hasil N-benzoiltiourea yang diperoleh lebih banyak daripada N-(4-nitrobenzoil)tiourea. Hal ini menunjukkan bahwa gugus nitro pada posisi *para* menurunkan kereaktifan senyawa 4-nitrobenzoil klorida. Gugus nitro mempengaruhi kereaktifan atom C karbonil melalui efek induktif sehingga pada 4-nitrobenzoil klorida lebih sulit untuk membentuk atom C karbonil yang bermuatan positif yang menyebabkan reaksi substitusi nukleofilik lebih sulit terjadi dan persentase hasil yang diperoleh lebih sedikit.