
SKRIPSI
KAJIAN ENERGETIK HIDROLISIS METIL ASETAT PADA
LINGKUNGAN ASAM



ELIN KHOIRUN NISAK

PROGRAM STUDI SARJANA FISIKA
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA
2022

LEMBAR PENGESAHAN NASKAH SKRIPSI

Judul : Kajian Energetik Hidrolisis Metil Asetat pada Lingkungan Asam
Penyusun : ELIN KHOIRUN NISAK
NIM : 081711333029
Nama Pembimbing I : ANDI HAMIM ZAIDAN M.Si., Ph.D.
Nama Pembimbing II : FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.
Tanggal Seminar : 23-05-2022 1:00 PM

Mengetahui,

Pembimbing 1



ANDI HAMIM ZAIDAN M.Si., Ph.D.

NIP. 198304222006041001

Pembimbing 2



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 198304222006041001

Mengetahui,
Ketua Departemen Fisika
Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Airlangga



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

Penyusun persembahkan skripsi ini
untuk Ibu dan Bapak
Muslihatun dan Hasin Alwi

PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI

Skripsi ini tidak dipublikasikan, namun tersedia di perpustakaan dalam lingkungan Universitas Airlangga.

Skripsi ini diperkenankan untuk dipakai sebagai referensi kepustakaan, tetapi pengutipan harus seizin penyusun dan harus menyebutkan sumbernya sesuai kebiasaan ilmiah.

Dokumen skripsi ini merupakan hak milik Universitas Airlangga.

SURAT PERNYATAAN TENTANG ORISINALITAS

Yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Elin Khoirun Nisak

NIM 081711333029

Program Studi : Fisika

Fakultas : Sains dan Teknologi

Jenjang : Sarjana (S1)

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan kegiatan plagiat dalam penulisan skripsisaya berjudul:

KAJIAN ENERGETIK HIDROLISIS METIL ASETAT PADA LINGKUNGAN ASAM

Apabila suatu saat nanti terbukti melakukan kegiatan tindakan plagiat, maka saya akan menerima sanksi yang telah diterapkan.

Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya.

Surabaya, 30 Mei 2022



Elin Khoirun Nisak

NIM. 081711333029

KATA PENGANTAR

Studi ini adalah tugas akhir yang dilakukan untuk syarat kelulusan di program studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga. Studi ini menjelaskan fenomena pengenceran terhadap hidrolisis metil asetat (MA) pada kondisi asam berdasarkan kalkulasi *Density Functional Theory* (DFT). Studi ini dirancang untuk mahasiswa tingkat strata satu (S1) yang sedang belajar untuk menyusun rumusan masalah dan metode penelitian untuk penelitian. Pada BAB 3 telah dipaparkan tujuh langkah utama dan dua langkah pengambilan keputusan untuk memperoleh grafik hubungan energi aktivasi $\Delta^\ddagger G^\circ$ terhadap jumlah molekul air (n). Setiap langkah dirancang untuk menjelaskan proses pemodelan, perancangan jalur reaksi, kalkulasi DFT, dan analisis kepada pembaca dalam mempelajari energi aktivasi.

Semua penjelasan dipaparkan pada BAB 4 studi ini. Hasil dan diskusi membahas mengenai setiap tahap pada BAB 3. Telah disertakan juga LAMPIRAN A (input kalkulasi untuk Rutin 1 **Gaussian16**) dan B (input kalkulasi untuk Rutin 2 **Gaussian16**) untuk mempermudah pembaca dalam mempelajari kalkulasi studi ini dengan lengkap.

Tabik,

Elin Khoirun Nisak

LEMBARAN TERIMA KASIH

Ucapan terimakasih penyusun sampaikan kepada semua pihak berikut ini yang telah membantu dalam penyusunan skripsi ini.

1. Bapak Febdian Rusydi, Ph.D., selaku guru yang dengan sabar dan ikhlas mencurahkan waktu, tenaga, dan pikirannya untuk mendidik kemampuan sains dan tingkah laku penyusun dan selaku pembimbing yang telah memberikan ide, bimbingan, dan arahan kepada penyusun hingga skripsi ini selesai.
2. Bapak Andi Hamim Zaidan, Ph.D., selaku pembimbing I yang telah memberikan bimbingan dan arahan kepada penyusun hingga skripsi ini selesai.
3. Bapak Herri Trilaksana, Ph.D., selaku penguji I yang memberikan kritikan saran dan motivasi yang membangun kepada penyusun.
4. Bapak Yhosep Gita Yhun Yhuwana, S.Si., selaku penguji II yang memberikan kritikan saran yang membangun kepada penyusun.
5. Ibu Ira Puspitasari, Ph.D., yang bersedia meluangkan waktu untuk berdiskusi sehingga penyusun mampu menyelesaikan skripsi ini,
6. Lusia Silfia Pulo Boli, S.Si., M.T. dan Rizka Nur Fadhilla, S.Si., M.T., yang telah bersedia membantu penyusun, bersedia meluangkan waktu, pikiran, dan tenaga untuk berdiskusi dalam pengerjaan skripsi ini,
7. Abdul Mu'in Abas, S.Pd., Dwi Wulandari, Amd. Keb., dan Moh. Hasan Reza Pratama Abas yang telah memberikan semangat, nasehat, dan motivasi dalam proses penyelesaian pendidikan penyusun,
8. Fitri Noor Febriana, S.Si, telah menyediakan pundak untuk menangis, memberi bantuan saat penyusun membutuhkan, dan bersedia meluangkan waktunya untuk berdiskusi dalam proses penulisan skripsi ini,
9. Dr. Vera Khoirunisa, S.Si., M.T., Etika Dessi Susanti, S.Si., Roichatul

LEMBARAN TERIMA KASIH

v

Madinah, S.Si., dan Daniel Elisandro, S.Si., yang telah bersedia meluangkan waktunya untuk berdiskusi dalam tata cara penulisan skripsi ini.

10. Jeremy Pamungkur Dulimar selaku rekan kerja yang bersedia meluangkan waktu dan tenaga untuk berdiskusi.
11. Siti Nurun Nafisah selaku rekan kerja yang membahas lanjutan dari studi ini yaitu mengenai hidrolisis basa.
12. Teman-teman di Theoretical Physics Student Association (TPSA), Eduardus Oldi Kristianto, Ayu Poernomo, Melani Yulia Sianggi, Alfaya Putri Farikha, Rayhan Fakhriza, Kevin Brilliantama, dan Raihana selaku pengumpul informasi terkait administrasi skripsi serta membantu dan menemani penyusun dalam menyelesaikan skripsi ini.

ABSTRAK

Pengenceran menyebabkan hidrolisis ester pada kondisi asam memiliki karakteristik mendekati hidrolisis ester netral. Apakah DFT mampu menjelaskan hal ini? Penelitian ini mengkaji hidrolisis metil asetat, salah satu jenis ester, pada kondisi asam. $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ adalah model asam. Pengenceran dilakukan dengan variasi nilai n pada model tersebut. DFT digunakan untuk menghitung energi aktivasi hidrolisis metil asetat pada kondisi asam tersebut. Hasil menunjukkan bahwa nilai energi aktivasi meningkat seiring dengan meningkatnya n . Peningkatan energi aktivasi ini mendekati nilai energi aktivasi pada $n=0$. Ini menunjukkan bahwa DFT mampu menjelaskan pengenceran menyebabkan hidrolisis MA pada kondisi asam memiliki karakteristik mendekati karakteristik hidrolisis MA pada kondisi netral.

Kata kunci: Density Functional Theory, Energi Aktivasi, Hidrolisis Metil Asetat, Kondisi Asam, Pengenceran.

ABSTRACT

The dilution causes the hydrolysis of esters in acid solution to have characteristics similar to that of neutral hydrolysis. Is DFT able to explain this? This research examined the hydrolysis of methyl acetate, a type of ester, in an acid solution. $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ was the model for the acid solution. The dilution was achieved by varying the value of n . DFT was used to calculate activation energy of the hydrolysis. The results showed that the activation energy increases as n increases. The increasing of the activation energy is closer to the activation energy for $n=0$. It means DFT can explain that the dilution causes the hydrolysis of methyl acetate in acid solution to have characteristics similar to that of neutral hydrolysis.

Kata kunci: Density Functional Theory, Activation Energy, Hydrolysis of Metil Asetat, Acid, Dilution.

DAFTAR ISI

Pedoman Penggunaan Skripsi	ii
Kata Pengantar	iii
Lembaran Terima Kasih	iv
Abstrak (versi Bahasa Indonesia)	vi
Abstract (English version)	vii
I Pendahuluan	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	2
I.3 Tujuan	2
I.4 Batasan Masalah	2
I.5 Manfaat Penelitian	3
II Studi Literatur	4
II.1 Hidrolisis Ester	4
II.1.1 Pemodelan Hidrolisis Ester secara Komputasi	4
II.1.2 Hidrolisis Ester pada lingkungan Asam	5
II.2 Diagram Level Energi	8
II.2.1 Jalur Reaksi	8
II.2.2 Besaran Termodinamika dan Kinetika Reaksi	9
II.3 Struktur Elektronik	10
II.3.1 Persamaan Schrödinger untuk Sistem Satu-elektron	10
II.3.2 Persamaan Schrödinger untuk Sistem N -elektron	12
II.4 Density Functional Theory	13
II.4.1 Persamaan Kohn-Sham	13

<i>DAFTAR ISI</i>	ix
II.4.2 Perhitungan Struktur Elektronik	14
III Metode Penelitian	15
III.1 Model Komputasi	15
III.2 Besaran Fisis	16
III.3 Langkah Kerja	16
III.3.1 Rutin 1: Optimisasi Keadaan Dasar	16
III.3.2 Rutin 2: Optimisasi Keadaan Transisi	19
III.4 Aktivitas penelitian	19
III.4.1 Tempat	19
III.4.2 Agenda dan Waktu	19
IV Hasil dan Pembahasan	21
IV.1 Model Molekul	21
IV.1.1 Model Asam	21
IV.1.2 Model Konformer MA	21
IV.2 Rancangan Jalur Hidrolisis	24
IV.3 Struktur Geometris	25
IV.3.1 Geometri koordinasi $H^+(H_2O)_n$ teroptimisasi	25
IV.3.2 Keadaan Inisial dan Final	26
IV.3.2.1 Keadaan Inisial dan Final untuk $n=0$	26
IV.3.2.2 Kemungkinan Posisi $H^+(H_2O)_n$ pada MA	29
IV.3.2.3 Keadaan Inisial dan Final untuk $n=1, 2$, dan 3	29
IV.3.3 Keadaan Transisi	30
IV.4 Jalur Hidrolisis	35
V Kesimpulan dan Saran	37
V.1 Kesimpulan	37
V.2 Saran	37
Bibliografi	38

<i>DAFTAR ISI</i>	x
Input File untuk Rutin 1	49
Input File untuk Rutin 2	51
Hasil Kalkulasi IRC	56
Input File untuk Rutin 1	49
Input File untuk Rutin 2	51
Hasil Kalkulasi IRC	56

DAFTAR GAMBAR

II.1	Mekanisme umum hidrolisis ester pada lingkungan asam yang diambil dari Ref. [McM15]. Simbol panah merah pada gambar menunjukkan perpindahan elektron. Simbol “:” adalah <i>lone pair</i> . Simbol “+” menunjukkan muatan atom menjadi lebih positif karena elektronnya berpindah.	7
II.2	Diagram level energi untuk sebuah reaksi kimia. Semua energi total sistem adalah energi relatif terhadap keadaan inisial (keadaan 1).	8
III.1	Struktur Kekulé metil asetat.	15
III.2	Diagram alir tugas akhir secara umum.	17
III.3	Uraian langkah 2–5 pada diagram alir tugas akhir (Gambar III.2).	18
IV.1	Ilustrasi geometri koordinasi $H^+(H_2O)$. Garis berwarna merah menandakan ikatan kovalen koordinasi antara H^+ dan atom O dari H_2O	21
IV.2	Ilustrasi geometri koordinasi $H^+(H_2O)_2$. (a) variasi sudut $\theta(O1, H1, O2, H2)$. (b) variasi sudut $\theta(H1, O1, H^+, O2)$. Sudut divariasikan dengan nilai 0° dan 90° . Garis berwarna merah menandakan ikatan kovalen koordinasi antara H^+ dan atom O dari H_2O	22
IV.3	Ilustrasi geometri koordinasi $H^+(H_2O)_3$. (a) Variasi sudut $\theta(O1, H1, O2, H3)$ dan $\theta(O1, H2, O3, H4)$. (b) Variasi sudut $\theta(O1, H1, O2, H3)$, $\theta(H1, O2, H3, O3)$, dan $\theta(O2, H3, O3, H4)$. (c) Variasi sudut $\theta(H1, O1, H^+, O3)$, $\theta(H3, O2, H^+, O1)$, dan $\theta(H4, O3, H^+, O2)$. Sudut divariasikan (secara permutasi) dengan nilai 0° dan 90° . Garis berwarna merah menandakan ikatan kovalen koordinasi antara H^+ dan atom O dari H_2O	23

DAFTAR GAMBAR

xii

IV.4 Geometri koordinasi $H^+(H_2O)_n$ teroptimisasi. Simbol “ n ” menandakan jumlah molekul air. Atom berwarna biru dan merah adalah hidrogen dan oksigen, secara berturut-turut.	26
IV.5 Energi total konformer metil asetat dengan konfigurasi spin singlet (1) dan triplet (3) pada diagram level energi.	27
IV.6 Geometri teroptimisasi molekul-molekul yang terlibat pada reaksi-reaksi di Persamaan IV.9 s.d. IV.12.	28
IV.7 Dua variasi geometri teroptimisasi konfigurasi $H^+(H_2O)$ pada MA.	30
IV.8 Kompleks $[MA-H^+(H_2O)_n]$ pada is. (sebelum TS). AA, Mt, dan kompleks $[Aa-H^+(H_2O)_n]$ pada fs. (sesudah TS). O, C dan H menunjukkan atom oksigen, karbon, dan hidrogen, secara berturut-turut. Penulisan angka menunjukkan atom ke- m . Atom-atom hidrogen milik MA tidak ditampilkan pada gambar.	31
IV.9 Geometri ts. untuk reaksi (a) hidrolisis netral dan (b-d) hidrolisis pada lingkungan asam yang diencerkan. Simbol “ n ” adalah jumlah molekul air (lihat Subbab IV.1.1). Atom berwarna biru, merah dan merah muda adalah hidrogen, oksigen dan karbon, secara berturut-turut.	32
IV.10 Jalur hidrolisis MA pada DLE.	36
IV.11 Nilai energi aktivasi ($\Delta^\ddagger G^\circ$) hidrolisis metil asetat untuk setiap nilai n . Simbol “ n ” adalah jumlah molekul air pada model asam $H^+(H_2O)_n$	36
C.2 Hasil kalkulasi IRC. Kalkulasi ini memastikan kompleks pada ts. yang didapat menghubungkan kompleks pada is. dan fs. . . .	56
C.2 Hasil kalkulasi IRC. Kalkulasi ini memastikan kompleks pada ts. yang didapat menghubungkan kompleks pada is. dan fs. . . .	56

DAFTAR TABEL

III.1 Agenda dan waktu pelaksanaan penelitian berdasarkan diagram alir pada Gambar III.2.	20
IV.1 Panjang ikatan (R , Å), sudut ikatan (A , deg.), dan sudut torsi (A , deg) molekul trans-metil asetat dan air pada keadaan singlet. Nilai Δ adalah selisih hasil kalkulasi dengan nilai eksperimen [PAH86]. Penomoran mengacu pada Gambar Gambar IV.6 (a) dan (b).	28
IV.2 Populasi muatan (e) pada atom penyusun trans-metil asetat dan air hasil kalkulasi NBO.	29
IV.3 Parameter 1 s.d. 4 adalah jarak antar-atom dan parameter 5 s.d. 7 adalah besar sudut pada ts. (kolom 3). $\Delta_{ts.-is.}$ di kolom 4 adalah selisih antara parameter di ts. dan is. $\Delta_{fs.-ts.}$ di kolom 5 adalah selisih antara parameter di fs. dan ts. Parameter-parameter di ts. , is. , dan fs. berasal dari geometri teroptimisasi di Gambar IV.9 dan Gambar IV.8. Tanda (-) menunjukkan pemendekan parameter R atau pengecilan parameter A dan D.(i)-(iv) menunjukkan parameter-parameter pada $n=0, 1, 2$, dan 3.	33
IV.4 Jarak antar-atom pada ts. untuk $n = 0, 1, 2$, dan 3. Nilai $\Delta_{n(n-1)}$ adalah selisih jarak antar-atom setiap parameter untuk n dan $(n - 1)$	34
IV.5 Populasi muatan (e) pada atom penyusun struktur kompleks teraktivasi [Trans-metil asetat-air] pada ts. hasil kalkulasi NBO.	34