

BAB I

PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Hidrolisis ester pada kondisi netral memiliki energi aktivasi yang tinggi. Rusydi, dkk. [Rus19] telah mempelajari efek konformasi pada energi aktivasi hidrolisis netral ester dengan kalkulasi berbasis (*Density Functional Theory*) (DFT). Ester yang digunakan sebagai objek penelitian adalah etil format, etil asetat, etil fluoroasetat, dan etil kloroasetat. Berdasarkan laporan Rusydi dkk., etil format dan etil asetat memiliki dua konformer; sedangkan etil fluoroasetat dan kloroasetat memiliki enam konformer. Setiap konformer berasosiasi dengan energi aktivasi yang berbeda. Untuk etil kloroasetat, rentang energi aktivasi adalah 51,81–55,28 kcal/mol (ekuivalen dengan 2,25–2,40 eV) dan berasosiasi dengan konstanta laju reaksi dengan orde 10^{-26} sampai dengan 10^{-23} (1/s). Artinya, secara praktis, hidrolisis ester membutuhkan katalis untuk menurunkan energi aktivasi.

Asam dapat berperan sebagai katalis untuk menurunkan energi aktivasi reaksi. Secara eksperimen, hidrolisis ester pada kondisi asam banyak dilakukan. Misalnya, pada proses pembuatan asam asetat pada cuka untuk makanan. Perubahan kondisi dari netral ke asam tidak mengubah produk hidrolisis ester, melainkan mekanisme reaksi. Mekanisme umum reaksi hidrolisis ester sudah dijelaskan di buku teks [McM15]. Mekanisme detail reaksi dapat dipelajari dengan kalkulasi berbasis DFT.

Penurunan energi aktivasi reaksi oleh katalis asam dipengaruhi oleh pengenceran.[Com08] Pengenceran (*dilution*) adalah proses penurunan konsentrasi zat terlarut (dalam kasus ini adalah asam) dalam larutan.[Pau70] Umumnya, pengenceran dilakukan dengan cara menambahkan air ke dalam larutan.

Semakin banyak air yang ditambahkan, semakin kecil konsentrasi zat terlarut. Artinya, semakin encer larutan tersebut (pH mendekati 7).

Tugas akhir ini mengkaji pengaruh pengenceran terhadap hidrolisis ester pada kondisi asam menggunakan kalkulasi berbasis DFT. Ester yang digunakan sebagai objek studi kasus adalah metil asetat. Ada satu hal yang menarik pada kajian ini. Ion H^+ adalah representasi asam secara umum. Ion H^+ tidak memiliki elektron. Sedangkan kalkulasi berbasis DFT digunakan untuk menghitung energi elektronik. Sehingga pada tugas akhir ini, ion H^+ dimodelkan sebagai $H^+(H_2O)_n$. Variasi nilai n pada $H^+(H_2O)_n$ digunakan untuk merepresentasikan pengenceran. Prosedur penelitian tugas akhir ini berbasis pada publikasi Rusydi, dkk. pada [Rus19].

I.2 Rumusan Masalah

Penelitian ini fokus pada permasalahan: **Apakah DFT mampu menjelaskan bahwa hidrolisis ester pada lingkungan asam yang diencerkan memiliki karakteristik mendekati hidrolisis ester pada lingkungan netral?**

I.3 Tujuan

Penelitian ini bertujuan untuk **mengevaluasi pengaruh pengenceran terhadap energi aktivasi hidrolisis metil asetat pada lingkungan asam.**

I.4 Batasan Masalah

Ada empat batasan masalah pada penelitian ini, yaitu:

1. Model reaksi yang ditinjau membedakan air yang menghidrolisis metil asetat dan air pada $H^+(H_2O)_n$.
2. Variasi nilai n pada $H^+(H_2O)_n$ merepresentasi pengenceran.

3. Nilai n pada $H^+(H_2O)_n$ adalah 0, 1, 2, dan 3 yang berasosiasi dengan $\Delta^\ddagger G_0^\circ$, $\Delta^\ddagger G_1^\circ$, $\Delta^\ddagger G_2^\circ$, dan $\Delta^\ddagger G_3^\circ$, secara berturut-turut.
4. Kalkulasi DFT menggunakan basis set 6-311++G(d,p) dan *exchange-corellation functional* Becke,3-parameter, Lee-Yang-Parr (B3LYP).

I.5 Manfaat Penelitian

Penelitian ini adalah bagian dari peta riset *Theoretical Physics Research Group*, Departemen Fisika, Universitas Airlangga. Tema umum dari peta riset tersebut adalah pengembangan implementasi DFT untuk pemodelan reaksi kimia pada proses biologis. Penelitian ini mengambil subtema pemodelan lingkungan secara diskrit. Ada tiga studi kasus untuk subtema tersebut.

1. Isomerisasi trans-HCOH menjadi H_2CO .
2. Hidrolisis ester pada lingkungan asam.
3. Hidrolisis ester pada lingkungan basa.

Tugas akhir ini adalah studi kasus ke-2. Penelitian ini diharapkan memberikan pengetahuan tentang (1) cara memodelkan ion H^+ sebagai representasi lingkungan asam sehingga kalkulasi berbasis DFT dapat digunakan untuk mempelajari reaksi tersebut dan (2) cara mengonstruksi jalur reaksi.