



Received : Sep 8th, 2021

Accepted : Nov 15th, 2021

Web Published ; Feb 28th, 2022

Study of Energy and Structure on Interactions Between Molecules In Solvents - Organic Solves Using Computational Chemical Methods

Nur Aisah Malau* and Asep Wahyu Nugraha

Chemistry Departement, Faculty of Mathematics and natural Sciences, Universitas Negeri Medan, 20371

Sumatera utara

*Email: nuraisahmalau970@gmail.com

ABSTRACT

This study aims to determine the amount of energy, the difference in energy, the relationship between the amount of energy and the distance between compounds, and the interactions that occur in organic solvent molecules using computational chemistry methods. In determining the amount of energy and interactions that occur, computational chemistry calculations are used using NWChem software version 6.6 with the DFT method with the B3LYP hybrid function/basis set 6-31G, the calculation results are visualized using Jmol software. The results of calculations with large computations of energy for benzene are -230.62447487 KJ/mol, ethanol -154.01322923 KJ/mol, methanol -114.98816558 KJ/mol, hexane are -235.27001385 KJ/mol. Mixture of benzene and ethanol in a ratio of 1 : 1 -384.63823964 KJ/mol, 1 : 2 538.66009762 KJ/mol, and 2 : 1 -615.26607558 KJ/mol. A mixture of benzene and methanol in a ratio of 1 : 1 -345.61255299 KJ/mol, 1 : 2 -460.60826254 KJ/mol, and 2 : 1 -576.24044425 KJ/mol, a mixture of hexane and ethanol in a ratio of 1 : 1 -389.28477268 KJ/mol, 1 : 2 -543.29869234 KJ/mol and 2 : 1 -624.55723290 KJ/mol. A mixture of hexane and methanol at a ratio of 1 : 1 -350.25984691 KJ/mol, 1 : 2 -465.26041654 KJ/mol and 2 : 1 -585.53373886 KJ/mole. The difference in energy is the most in a mixture of benzene and ethanol in a ratio of 1 : 2 -0.00916429 K/mol, in a mixture of benzene and methanol in a ratio of 1 : 2 -0.00745651 KJ/mol, a mixture of hexane and ethanol in a ratio of 2 : 1 -0.00397597 KJ/mol, and a mixture of hexane and methanol in a ratio of 1 : 2 -0.01407153 KJ/mol. and there is no relationship between the magnitude of the interaction energy of the mixture with the distance between the molecules.

Keywords: Nwchem Software, DFT, Computing, Energy, Organic Solvents

I. Pendahuluan

Larutan adalah campuran homogen dari molekul, atom ataupun ion dari dua zat atau lebih . Suatu. Larutan disebut suatu campuran karena susunannya dapat berubah – ubah. Larutan merupakan bahan yang penting untuk dipelajari

terutama menyangkut sifat komponen dan sifat larutan itu sendiri. Pengetahuan ini bermanfaat dalam memprediksi jenis pelarut yang tepat dalam proses – proses tertentu ,misalnya dalam isolasi bahan kimia dari bahan alam tertentu, pelarut suatu bahan untuk berbagai keperluan praktis, pengembangan teori terutama menyangkut

campuran biner, campuran terner, serta keperluan – keperluan lainnya dalam bidang sains dan teknologi.¹

Pelarutan merupakan interaksi antar molekul yang terlibat dalam pembentukan larutan, dimana pelarut yang digunakan pada penelitian kali ini adalah pelarut – pelarut organik yang bersifat polar dan non – polar seperti benzena, etanol, metanol, heksana dengan berbagai variasi perbandingan interaksi yang akan digunakan yaitu perbandingan 1 : 1, 1 : 2, 2 : 1. Bila dua macam senyawa murni yang tidak saling bereaksi dicampurkan ada tiga kemungkinan yang akan terjadi, yaitu terbentuk larutan ideal, larutan reguler dan larutan non ideal. Bila gaya molekul adalah sama diantara AA, AB, dan BB, yaitu $U_{AB} = U_{AA} = U_{BB}$, maka larutan tersebut otomatis disebut ideal.² Larutan non ideal adalah larutan yang karena interaksi diantara kedua senyawanya menyebabkan penyimpangan dari hukum Raoult. Larutan reguler adalah larutan yang karena interaksi diantara kedua senyawa – senyawanya menyebabkan menyimpang dari hukum Raoult tetapi tidak mengalami perubahan entropi eksek.^{4,5}

Density Functional Theory (DFT) adalah salah satu metode yang digunakan untuk perhitungan secara komputasi. Metode ini memiliki kelebihan dibandingkan metode sebelumnya yaitu dapat menghitung senyawa kompleks yang lebih sederhana, cepat dan terpenting hasilnya tidak jauh berbeda dengan data riset laboratorium. Dalam hal ini metode *Density Functional Theory* (DFT) mengandalkan densitas electron sebagai besaran dasarnya maka persamaan scrodinger dapat diselesaikan dengan lebih mudah dan sederhana.⁶

Telah banyak dilakukan penelitian tentang kajian energi dan struktur pada interaksi antar molekul pada pelarut- pelarut organik seperti pada pengembangan metode penentuan jenis pelarut senyawa – senyawa organik berdasarkan kajian termodinamika kimia melalui pendekatan pemodelan molekul dan eksperimen dilaboratorium. yang membahas tentang studi termodinamika dan kimia kuantum pada konversi chorismate menjadi piruvat dan 4 hidroksi benzoat. Yang membahas tentang pengaruh mekanika kuantum terhadap energi bebas pelarutan ion menggunakan metode komputasi, yang membahas tentang pengaruh mekanika terhadap energi bebas pelarutan ion menggunakan metode komputasi,

yang membahas tentang simulasi klasik dan kuantum pada larutan tripton, yang membahas simulasi molekul dinamis klasik pada air dan es, yang membahas studi ikatan hidrogen sistem metanol-metanol dan etanol-etanol dengan metode molekular dinamik.^{2,3}

Berdasarkan penelitian tersebut, maka Penelitian ini bertujuan untuk mengembangkan metode dalam kajian energi dan struktur pada interaksi antar molekul pada pelarut-pelarut organik menggunakan metode kimia komputasi.

II. Metodologi Penelitian

2.1. Waktu Dan Tempat Penelitian

Penelitian ini telah dilaksanakan di laboratorium kimia komputasi Jurusan, FMIPA Universitas Negeri Medan.

2.2. Perangkat penelitian

Penelitian ini merupakan kajian pemodelan molekul menggunakan perhitungan kimia komputasi, sehingga dalam pelaksanaan perhitungan ini sepenuhnya menggunakan perangkat computer.

2.3 Prosedur Penelitian

Adapun langkah – langkah penelitian sebagai berikut :

1. Persiapan komputer dengan menginstall software NWChem 6.6 dan software Avogadro dan Jmol untuk visualisasi hasil perhitungan.
2. Penyusunan input NWChem dalam notepad
 - a. Mengubah struktur menjadi data cartesian
 - b. Membuat perintah-perintah tambahan untuk perhitungan komputasi seperti muatan, multiplisitas, basis set, perintah hitungan (DFT).
3. Melakukan perhitungan komputasi
 - a. Open terminal dalam ubuntu.
 - b. Membuat folder perhitungan.
 - c. Masuk ke folder perhitungan
 - d. Menuliskan perintah perhitungan \rightarrow nwchem nama folder.nw1 > nama file.log&
 - e. Mengecek nomor perhitungan sekaligus mengecek apakah perhitungan berjalan
 - f. Ketik top
 - g. Nomor perhitungan akan menghilang bila perhitungan sudah selesai.
 - h. Mengecek hasil perhitungan dengan cara less nama file.log tekan enter.

- i. Bila perhitungan selesai, maka data hasil perhitungan terdapat "Optimization Converged".
 - j. Bila tidak ada maka perlu dilihat apakah ada informasi tentang penyebab "error" untuk melakukan perbaikan input.
 - k. Setelah input data diperbaiki, maka dilakukan perhitungan ulang dan kembali ke bagian c.
4. Membuat visualisasi hasil perhitungan
 - a. Buka program Jmol pada laptop atau komputer
 - b. Buka file.log sehingga diperoleh struktur senyawa yang dihasilkan.
 - c. Bila struktur sesuai dengan teori maka perhitungan komputasi sukses, jika tidak sesuai maka perhitungan diulangi kembali.
 - d. Jika struktur sudah sesuai maka simpan struktur tersebut dalam bentuk JPG.
 5. Ulangi prosedur yang sama untuk struktur benzena, etanol, metanol, heksana, campuran senyawa benzena dan etanol, benzena dan metanol, heksana dan etanol, heksana dan metanol pada perbandingan 1 : 1, 1 : 2 dan 2 : 1.

III. Hasil dan pembahasan

3.1 Hasil Penelitian

Tabel 1. Data Hasil Perhitungan Menggunakan Metode Hibrid/ Basic Set B3lyp/ 6- 31G.

| No | Nama Senyawa | Besarnya Energi (HF) |
|-----|-------------------------|------------------------|
| 1. | Benzena | -230.62447487 KJ/mol |
| 2. | Etanol | -154.01322923 KJ/mol |
| 3. | Metanol | -114.98816558 KJ/mol |
| 4. | Heksana | -235.27001385 KJ/mol |
| 5. | Benzena dan etanol | -384.63823964 KJ/mol |
| 6. | 1 benzena dan 2 etanol | -538.66009762 KJ/mol |
| 7. | 2 benzena dan 1 etanol | -615.26607558 KJ/mol |
| 8. | Benzena dan methanol | -345.61255299 KJ/mol |
| 9. | 1 benzena dan 2 metanol | -460.60826254 KJ/mol |
| 10. | 2 benzena dan 1 metanol | -576.24044425 KJ/mol |
| 11. | Heksana dan etanol | -389.28477268 KJ/mol |
| 12. | 1 heksana dan 2 etanol | -543.29869234 KJ/mol |

| | | |
|-----|-------------------------|----------------------|
| 13. | 2 heksana dan 1 etanol | -624.55723290 KJ/mol |
| 14. | Heksana dan methanol | -350.25984691 KJ/mol |
| 15. | 1 heksana dan 2 metanol | -465.26041654 KJ/mol |
| 16. | 2 heksana dan 1 | -585.53373886 KJ/mol |

3.2 Campuran senyawa pelarut Organik

1. Benzena dan Metanol

a. Selisih Energi

Tabel 2. Selisih Energi Campuran Benzena Dan Etanol

| No | Nama Senyawa | Perbandingan | Selisih Energi (KJ/mol) |
|----|------------------------|--------------|-------------------------|
| 1. | Benzena dan etanol | 1 : 1 | - 0,00053554 KJ / mol |
| 2. | 1 benzena dan 2 etanol | 1 : 2 | - 0,00916429 KJ / mol |
| 3. | 2 benzena dan 1 etanol | 2 : 1 | - 0,00389661 KJ/ mol |

Dari tabel 2 diketahui bahwa selisih energi yang paling rendah adalah pada campuran benzena dan etanol dengan perbandingan 1 : 2 sebesar - 0,00916429 KJ / mol, dari hasil selisih energi ini dapat diketahui bahwa campuran benzena dan etanol pada perbandingan 1 : 2 merupakan campuran yang paling stabil.

b. Kajian Interaksi Antar Molekul Campuran Benzena Dan Etanol

Tabel 3. Jarak Variasi Interaksi Antar Molekul Campuran Benzena dan Etanol.

| No | Variasi Senyawa | Jarak |
|----|------------------------|----------------|
| 1. | Benzena dan Etanol | 2.88 Å |
| 2. | 1 Benzena dan 2 Etanol | 2.5 Å, 2.44 Å |
| 3. | 2 Benzena dan 1 Etanol | 2.86 Å, 3.39 Å |

Dari tabel 3 diketahui jarak yang paling pendek adalah pada campuran benzena dan etanol pada perbandingan 1 : 2 dengan jarak sekitar 2.5 Å, 2.44 Å. Hasil menunjukkan bahwa campuran benzena dan etanol dengan energi yang paling

rendah juga memiliki jarak antara atom yang paling pendek.

2. Campuran Benzena dan Metanol

a. Selisih energi

Tabel 4. Selisih Energi Campuran Benzena Dan Metanol

| No | Nama Senyawa | Perbandingan | Selisih Energi (KJ/mol) |
|----|-------------------------|--------------|-------------------------|
| 1. | Benzena dan metanol | 1 : 1 | 0,00008746 KJ / mol |
| 2. | 1 Benzena dan 2 metanol | 1 : 2 | - 0,00745651 KJ / mol |
| 3. | 2 Benzena dan 1 metanol | 2 : 1 | - 0,00332893 KJ / mol |

Dari tabel 4 diketahui bahwa selisih energi yang paling rendah adalah pada campuran benzena dan metanol dengan perbandingan 1 : 2 sebesar - 0,00745651 KJ / mol, dari hasil selisih energi ini dapat diketahui bahwa campuran benzena dan metanol pada perbandingan 1 : 2 merupakan campuran yang paling stabil.

b. Kajian Interaksi Antar Molekul Campuran Benzena Dan Metanol

Tabel 5. Jarak Variasi Interaksi Antar Molekul Campuran Benzena Dan Metanol.

| No | Variasi Senyawa | Jarak |
|----|-------------------------|-----------------|
| 1. | Benzena dan metanol | 2.53 Å |
| 2. | 1 Benzena dan 2 metanol | 2.95 Å , 2.8 Å |
| 3. | 2 Benzena dan 1 metanol | 2.88 Å , 2.91 Å |

Dari tabel 5 diketahui jarak yang paling pendek adalah pada campuran benzena dan metanol pada perbandingan 1 : 1 dengan jarak sekitar 2.53 Å. Hasil menunjukkan bahwa campuran benzena dan metanol dengan energi paling rendah tidak memiliki jarak antar atom yang paling pendek

3. Campuran Heksana Dan Etanol

a. Selisih energy

Tabel 6. Selisih Energi Campuran Heksana Dan Etanol

| No | Nama Senyawa | Perbandingan | Selisih Energi (KJ/mol) |
|----|--------------------|--------------|-------------------------|
| 1. | heksana dan etanol | 1 : 1 | - 0,00152960 KJ / mol |

| | | | |
|----|------------------------|-------|-----------------------|
| 2. | 1 heksana dan 2 etanol | 1 : 2 | - 0,00222003 KJ / mol |
| 3. | 2 heksana dan 1 etanol | 2 : 1 | - 0,00397597 KJ/mol |

Dari tabel 6 diketahui bahwa selisih energi yang paling rendah adalah pada campuran heksana dan etanol dengan perbandingan 2 : 1 sebesar - 0,00397597 KJ / mol, dari hasil selisih energi ini dapat diketahui bahwa campuran heksana dan etanol pada perbandingan 2 : 1 merupakan campuran yang paling stabil.

b. Kajian Interaksi Antar Molekul Campuran Heksana Dan Etanol

Tabel 7. Jarak Variasi Interaksi Antar Molekul Campuran Heksana Dan Etanol.

| No | Variasi Senyawa | Jarak |
|----|------------------------|-----------------|
| 1. | Heksana dan etanol | 5.71 Å |
| 2. | 1 heksana dan 2 etanol | 2.77 Å , 2.59 Å |
| 3. | 2 heksana dan 1 etanol | 2.52 Å , 3.25 Å |

Dari tabel 7 diketahui jarak yang paling pendek adalah pada campuran heksana dan etanol pada perbandingan 1 : 2 dengan jarak sekitar 2.77 Å , 2.59 Å. Hasil menunjukkan bahwa campuran heksana dan etanol dengan energi paling rendah tidak memiliki jarak antar atom yang paling pendek.

4. Campuran Heksana Dan Metanol

a. Selisih energy

Tabel 8. Selisih Energi Campuran Heksana Dan Metanol

| No | Nama Senyawa | Perbandingan | Selisih Energi (KJ/mol) |
|----|-------------------------|--------------|-------------------------|
| 1. | Heksana dan metanol | 1 : 1 | -0,00166748 KJ / mol |
| 2. | 1 heksana dan 2 metanol | 1 : 2 | -0,01407153 KJ / mol |
| 3. | 2 heksana dan 1 metanol | 2 : 1 | -0,00554558 KJ / mol |

Dari tabel 8 diketahui bahwa selisih energi yang paling rendah adalah pada campuran heksana dan metanol dengan perbandingan 1 : 2 sebesar - 0,01407153 KJ/mol, dari hasil selisih energi ini dapat diketahui bahwa campuran heksana dan

metanol pada perbandingan 1 : 2 merupakan campuran yang paling stabil.

b. Kajian Interaksi Antar Molekul Campuran Heksana Dan Metanol

Tabel 9. Jarak Variasi Interaksi Antar Molekul Campuran Heksana Dan Metanol.

| No | Variasi Senyawa | Jarak |
|----|-------------------------|-----------------|
| 1. | Heksana dan metanol | 2.68 Å |
| 2. | 1 Heksana dan 2 metanol | 2.73 Å , 3.34 Å |
| 3. | 2 Heksana dan 1 metanol | 2.77 Å, 3.84 Å |

Dari tabel 9 diketahui jarak yang paling pendek adalah pada campuran heksana dan metanol pada perbandingan 1 : 1 dengan jarak sekitar 2.68 Å. Hasil menunjukkan bahwa campuran benzena dan metanol dengan energi yang paling rendah tidak memiliki jarak atom yang paling pendek.

3.3 Hubungan Antara Besarnya Energi Interaksi Campuran Dengan Jarak Antar Molekul

Senyawa campuran yang memiliki besar energi yang paling rendah adalah pada perbandingan 1 : 2 dan merupakan campuran yang paling stabil, sedangkan senyawa campuran yang memiliki energi paling besar adalah pada perbandingan 1 : 1 dan merupakan campuran yang tidak stabil. Dari paparan diatas diketahui juga bahwa senyawa campuran yang memiliki jarak partikel yang paling pendek adalah pada perbandingan 1 : 1, sedangkan jarak partikel yang paling panjang adalah pada perbandingan 2 : 1. Sehingga dapat diketahui bahwa tidak ada hubungan antara besarnya energi interaksi campuran dengan jarak antar molekul.

IV. Kesimpulan

Besar energi dari hasil perhitungan kimia komputasi dengan menggunakan metode B3LYP/6-31G untuk senyawa benzena besar energinya -230.62447487 KJ/mol , etanol sebesar -154.01322923 KJ/mol, metanol sebesar -114.98816558 KJ/mol, heksana sebesar -235.27001385 KJ/mol. Campuran benzena dan etanol pada perbandingan 1 : 1 sebesar -384.63823964 KJ/mol, perbandingan 1 : 2 sebesar -538.66009762 KJ/mol, dan pada perbandingan 2 : 1

sebesar -615.26607558 KJ/mol. Campuran benzena dan metanol pada perbandingan 1 : 1 sebesar -345.61255299 KJ/mol, perbandingan 1 : 2 sebesar -460.60826254 KJ/mol, dan perbandingan 2 : 1 sebesar -576.24044425 KJ/mol, Campuran heksana dan etanol pada perbandingan 1 : 1 sebesar -389.28477268 KJ/mol, perbandingan 1 : 2 sebesar -543.29869234 KJ/mol dan pada perbandingan 2 : 1 sebesar -624.55723290 KJ/mol. Campuran heksana dan metanol pada perbandingan 1 : 1 sebesar -350.25984691 KJ/mol, perbandingan 1 : 2 sebesar -465.26041654 KJ/mol dan perbandingan 2 : 1 sebesar -585.53373886 KJ/mol. Selisih energi yang paling stabil pada senyawa campuran adalah pada campuran benzena dan etanol dengan perbandingan 1 : 2 sebesar -0,00916429 KJ / mol, pada campuran benzena dan metanol dengan perbandingan 1 : 2 sebesar -0,00745651 KJ/mol, campuran heksana dan etanol dengan perbandingan 2 : 1 sebesar -0,00397597 KJ / mol, dan campuran heksana dan metanol dengan perbandingan 1 : 2 sebesar -0,01407153 KJ / mol. Interaksi yang membentuk besar energi paling rendah adalah pada campuran heksana dan metanol pada perbandingan 1 : 2 sebesar -0,01407153 KJ /mol. Tidak ada hubungan antara besarnya energi interaksi campuran dengan jarak antar molekul.

Referensi

1. A.W. Nugraha. (2009). "Kajian Termodinamika Pencampuran Pada Campuran Biner Benzena-Etanol". *Jurnal Penelitian Sainatika*. 9(2), pp. 51-56.
2. A.W. Nugraha. (2004). "Evaluasi Jenis Kompleks Molekuler Pada Campuran Biner Asetonitril-Metanol Melalui Pengukuran Tekanan Uap Total". *Jurnal Sains Indonesia*. 28(2), pp. 80-87.
3. M. Damanik & M. Murkovic. (2019, Jan). "Derivatisation of 2,4 (dinitrophenyl hydrazine) DNPH in canola oil oxidation". *Indonesian Journal of Chemical Science and Technology*. 02(1), pp. 80-83.
4. A.W. Nugraha & M.A Martoprawiro. (2013). "Pengembangan Metode Penentuan Jenis Pelarut Senyawa-Senyawa Organik Berdasarkan Kajian Termodinamika Kimia Melalui Pendekatan Pemodelan Molekul Dan Eksperimen Di Laboratorium". *Jurnal Penelitian Sainatika*. 13(1), pp. 48-57.
5. M. Zubir., H.I. Nasution., & M.S. Syafei. (2019, Jan). "Metal organic frameworks of CPL-4 and CPL-5 synthesis characterization

- under magnetic fields”. *Indonesian Journal of Chemical Science and Technology*. 02(1), pp. 61-65
6. N.T. Pongajow., J. Juliandri., & I. Hastiawan. (2017, Agustus). “Penentuan Geometri Dan Karakteristik Ikatan Senyawa Kompleks Ni (II)-Dibutilditiokarbamat Dengan Metode Density Functional Theory”. *Indonesian Journal Of Applied Sciences*. 7(2), pp. 33-36