

41/93
C/21

FMIPA

LAPORAN PENELITIAN
KONTRAK NO. 04/PP-UA/OPF-9/1992
TANGGAL 5 SEPTEMBER 1992

MENENTUAN PARAMETER ATOM N SECARA
SEMIEMPERIS UNTUK MENDAPATKAN DISTRIBUSI
ELEKTRON PADA SENYAWA HETEROSIKLIK

OLEH :

- Drs. Jufri Mustafa
- Drs. Abu Bakar, MS
- DR. Theresia Sita Kusuma
- Dra. Refinel
- Drs. Syukri

KETUA PELAKSANA
ANGGOTA
ANGGOTA
ANGGOTA
ANGGOTA

FAKULTAS FMIPA



DEPARTEMEN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN
Pusat Penelitian UNIVERSITAS ANDALAS
DIBIYAI DENGAN DANA PROYEK
OPERASI DAN PERAWATAN FASILITAS
DARI UNIVERSITAS ANDALAS TH 1992/1993
PADANG 1993

MENENTUKAN PARAMETER ATOM N SECARA SEMIEMPERIS UNTUK
MENDAPATKAN DISTRIBUSI ELEKTRON PADA SENYAWA HETEROSIKLIK

DJUFRI MUSTAFA, Cs, FMIPA UNAND, tahun 1992

ABSTRAK

Penentuan parameter h dan k senyawa poliazol menggunakan metoda Huckel Molekul Orbital dengan mengasumsikan urutan tingkatan energi metoda MNDO. Nilai parameter h dan k yang didapatkan digunakan untuk mendapatkan distribusi elektron pada senyawa diazol. Hasil penentuan parameter h dan k senyawa poliazol didapatkan nilai $h_C=1$; $h_{NH}=1,5$; $h_N=0,4$; $k_{NNH}=0,9$; $k_{CNH}=0,64$; $k_{NH}=0,66$; $k_{CN}=0,6$ dan $k_{CC}=0,82$.

Nilai k_{NN} ; k_{CN} dan k_{CC} untuk ikatan rangkap dan tunggal mempunyai nilai yang sama.

Distribusi elektron senyawa diazol yang banyak pada hetero atom N dan terbanyak pada atom N yang mempunyai atom H.

I. PENDAHULUAN

E. Fos dan J.Vilarrosa⁴⁾ telah menggunakan metoda MNDO (Minimal Negket Differential Overlaps) untuk menentukan panas pembentukan (ΔH_f) senyawa poliazin dan poliazol. Metoda ini terkenal ampuh dalam menentukan ΔH_f senyawa organik yang harus dioperasikan pada komputer yang mempunyai memori besar dan kecepatan berhitung tinggi. Oleh karena pada Jurusan Kimia FMIPA Universitas Andalas belum mempunyai komputer jenis tersebut maka dicoba untuk menentukan energi total (E_{total}) senyawa poliazol dengan menggunakan metoda Huckel.

Metoda Huckel merupakan metoda semiempiris yang dapat digunakan untuk menentukan E_{total} senyawa-senyawa yang mempunyai ikatan ganda berkoyucasi⁵⁾. Untuk ini setiap atom dalam molekul diperlukan parameter masukan h yang mewakili energi rata-rata sebuah elektron π pada atom tertentu yang berapa dalam suatu beda potensial yang dihasilkan oleh seluruh molekul. Disamping itu juga diperlukan parameter k yang merupakan energi overlaps antara orbital atom didalam molekul. Harga h dan k dari setiap atom disamping ditentukan oleh atom itu sendiri juga dipengaruhi oleh atom tetangganya. Oleh karena itu setiap atom tidak mempunyai nilai parameter h dan k yang absolut, tetapi mempunyai suatu rentangan nilai.

Dalam penelitian ini E_{total} yang ditentukan menurut metoda Huckel diasumsikan sebanding dengan H_f yang diamati secara metoda MNDO.

V HASIL DAN PEMBAHASAN

Dalam menentukan parameter h dan k diamati senyawa-senyawa triazol dan tetrazol pada tabel 3 yang selanjutnya disusun urutan tingkatan E_{total} , sedangkan untuk mendapatkan distribusi elektron diamati pada senyawa diazol pada tabel 4.

Tabel 5. Nilai Energi total beberapa senyawa polyazol menurut metoda Huckel dengan parameter $h_C = 1$; $h_{NH} = 1,5$; $k_{N-N-H} = 0,85$; $k_{CNH} = 0,8$; $k_{NN} = 0,92$; $k_{CN} = 0,5$; $k_{CC} = 0,82$.

No.urut	Nama Senyawa	E_{total}	Urutan Tingkatan Energi
senyawa :		β kkal	menurut MNDO
3	: 1,2,4 - triazol	: 7,58262	: 2 2
2	: 1,2,5 - triazol	: 7,98588	: 5 5
4	: 1,3,4 - triazol	: 8,03174	: 1 1
1	: 1,2,3 - triazol	: 8,59179	: 3 3
6	: 1,2,3,5 - tetrazol	: 8,72106	: 6 6
5	: 1,2,3,4 - tetrazol	: 9,26208	: 4 4

Dengan menggunakan parameter diatas hingga tidak ada satupun senyawa yang memenuhi urutan tingkatan energi menurut MNDO.

Nilai k dari (N-N) tidak bisa disamakan dengan nilai k (N=N) karena pada (N-N) masih sangat mungkin beresonansi sedangkan pada (N=N) resonansi dan konyugasi dihalangi oleh elektron bebas pada atom N untuk harga k (N-N) jauh lebih kecil dari k (N=N) yang beresonansi.

VI. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Parameter h dan k menurut metoda Hückel untuk senyawa poliazol didapatkan nilai $h_C = 1$; $h_{NH} = 0,5$; $h_N = 0,4$; $k_{NNA} = 0,9$; $k_{CNH} = 0,84$; $k_{NN} = 0,66$; $k_{CN} = 0,6$; $k_{CC} = 0,81$.

Parameter $k_{N=N}$; $k_{C=N}$ dan $k_{C=C}$ dalam ikatan rangkap sama dengan tatan tunggal masing-masingnya distribusi elektron yang besarpada senyawa diazol adalah pada hetero atom N dan yang terbesar pada atom N yang mempunyai H.

Parameter h dan k hitero atom berbeda dalam senyawa poliazol dan senyawa polyazin.

2 Saran

Nilai parameter yang didapatkan ini dapat digunakan pada senyawa N heterosiklik lainnya untuk menghitung energi total dan posisi kereaktifan suatu senyawa.

VIII. DAFTAR PUSTAKA

1. Admarita(1992), Penentuan Parameter h dan k Senyawa Heteroatom N Aromatik dengan metoda Huckel , Tesis Sarjana Kimia , FMIPA Unand.
2. Andrew Streitweiser JR (1962), "Molecular Orbital Theory For Organic Chemistry", John Willey & Sons, New York : 33 - 134.
3. Clark (1985), "A Hand Books Of Computational Chemistry", John Willey & Sons New York : 140 -150.
4. E. Fos and J.Velazrosa (1985), MNDO Semiempirical and 4-316 ab Initio SCF - MO Calculations Of Hetero Aromatic Compounds, J.Org, Chem 50 : 4894 - 4899.
5. J.P.Howe (1978), "Quantum Chemistry" Academic Press, 3rd Inc, New York.
6. Morrison and Boyd (1978), "Organic Chemistry" 3th ed, Printice Hall, India : 1002 - 1022.