

RINGKASAN

Teori Orbital Molekul Hückel sederhana yang banyak menggunakan aproksimasi dalam menyelesaikan persamaan mekanika kuantum, berguna dalam prediksi sifat molekuler. Dalam penelitian ini, dicoba studi teoritis menggunakan teori tersebut untuk memprediksi kereaktifan beberapa molekul organik. Hasil perhitungan valensi bebas ternyata sesuai dengan prediksi kualitatif mengenai kestabilan zat antara dalam reaksi substitusi aromatik elektrofilik. Selain itu, teori ini juga dapat menghitung energi delokalisasi yang berhubungan dengan kestabilan molekul aromatik, yang sesuai juga dengan prediksi kualitatif.

Penggambaran grafik valensi bebas dengan logaritma laju relatif dan konstanta reaktifitas substituen menghasilkan garis lurus. Ini berarti valensi bebas berhubungan linier dengan reaktifitas molekul. Meskipun demikian, perlu dipertimbangkan pula adanya efek rintangan sterik yang berperan penting dalam kestabilan molekul.

Adanya heteroatom dalam sistem molekul menyebabkan ketidaksesuaian harga perhitungan dengan hasil eksperimen, sehingga teori orbital molekul Hückel sederhana lebih cocok digunakan untuk prediksi kereaktifan molekul hidrokarbon.



SUMMARY

Simple Hückel molecular orbital theory which used many of approximations to finish quantum mechanical equations, is useful to predict molecular properties. By using this theory, it has been tried in this research the theoretical study to predict reactivity of some organic molecules. The calculated results of free valence are suitable with qualitative predictions about stability of intermediate state in the electrophilic aromatic substitution reaction. In other that, the theory can also give the delocalization energy which related with stability of aromatic molecules, that suitable with qualitative predictions, too.

The correlations of free valence versus logarithma relative rate and substituent reactivity constant, giving a straight line curve. It means that free valences and molecular reactivities are linearly related. However, it is useful to consider steric effect which is important in the stability of molecules.

Heteroatoms in molecule systems make the calculated results are not fixed with experiment results, so that simple Hückel molecular orbital theory can be used well to predict hydrocarbon reactivity.

