

Lembar II

Judul Skripsi : Penerapan Teori Orbital Molekul
Hückel Sederhana dalam Studi
Sintesa Molekul Organik.
Nama : Nita Kusumawati S.
N I M : J. 301 89 0295

Telah diujikan pada ujian Sarjana pada tanggal
..... dan dinyatakan lulus.

Semarang, Juni 1993

Pembimbing I

Panitia Ujian

Ketua,



Drs. Soemartono Marsigit, Apt. Drs. Soemartono Marsigit, Apt

NIP. 130 257 002

NIP. 130 257 002

Pembimbing II



Drs. Parsaoran Siahaan, MS.

NIP. 131 875 473

KATA PENGANTAR

Terpujilah Tuhan atas kasih dan karunia-Nya sehingga skripsi ini dapat dibuat dan diselesaikan. Dalam menyelesaikan skripsi ini, digunakan bantuan Program Komputer untuk mendapatkan data indeks kereaktifan dari molekul-molekul organik, sehingga pekerjaan ini telah membuka kesadaran saya akan pentingnya bidang ilmu lain untuk menyelesaikan permasalahan kimia.

Ucapan terima kasih saya sampaikan kepada Bapak Drs. Parsaoran Siahaan, MS. dan Bapak Drs. Soemartono Marsigit, Apt. yang telah banyak memberikan saran dan dorongan bagi penulis. Selain itu juga kepada Bapak Dede Karyana, MS., yang telah membantu dalam penyediaan Program Komputer serta kepada bapak-bapak serta ibu-ibu dosen lain yang telah mendidik penulis semenjak memasuki bangku Universitas ini. Juga kepada pihak lain yang telah banyak membantu saya, yang tak bisa saya sebutkan satu persatu.

Akhir kata, semoga hasil penelitian ini dapat bermanfaat dalam menunjang penelitian selanjutnya dan segala koreksi serta saran dari setiap pembaca sangat diharapkan.

Semarang, Juni 1993

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI I	i
LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI II	ii
KATA PENGANTAR	iii
RINGKASAN.....	iv
SUMMARY	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GRAFIK.....	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Permasalahan	1
1.2 Tujuan Penelitian	2
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Metode Variasi	4
2.2 Orbital Molekul Huckel (HMO)	7
2.3 Hidrokarbon Alternant (AH) dan Nonalternant (non-AH).....	9
2.4 Kerapatan Elektron	10
2.5 Order Ikatan dan Valensi Bebas	11
2.6 Superdelokalisabilitas	13
2.7 Aturan Huckel : $4n + 2$	14
2.8 Aromatisitas dan Pseudoaromatisitas	17
2.9 Heteroatom	22
BAB III METODE PENELITIAN	25
3.1 Alat dan Bahan	25

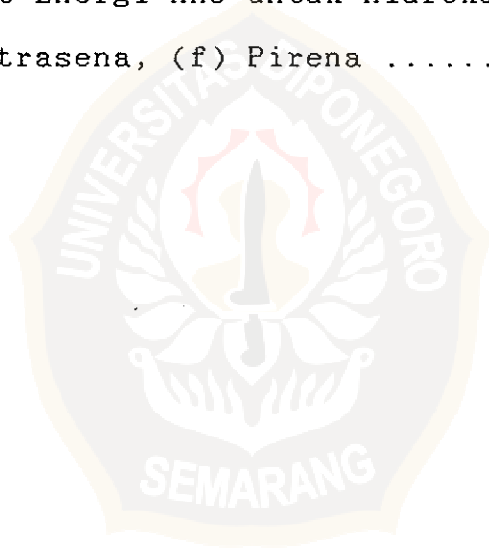
3.2	Proses Pengerjaan	25
BAB IV	HASIL PERHITUNGAN	27
4.1	Determinan Sekular.....	27
4.2	Tingkat Energi	28
a, b.	Trifenilena dan Krisena.....	28
c, d.	3,4-Benzfenantrena dan Tetrafena.....	29
e, f.	Tetrasena dan Pirena.....	30
4.3	Indeks Kereaktifan Valensi Bebas (F_r).....	31
BAB V	PEMBAHASAN	36
5.1	Valensi Bebas (F_r).....	36
5.2	Energi Delokalisasi (DE).....	39
5.3	Sintesa Beberapa Senyawa Organik	42
a.	Sintesa Krisena	42
b.	Sintesa senyawa kuinon.....	43
c.	Sintesa Tetrafena.....	44
d.	Sintesa Tetrafena.....	45
e.	Sintesa Tetrasena.....	46
f.	Sintesa Tetrasena-5,12-kuinon.....	47
g.	Sintesa Tetrasenkuinon dan Tetrafenkuinon.....	48
5.4	Energi Elektron- Π	52
5.5	Indeks Kereaktifan (Frontier Orbital) dan Indeks Kereaktifan (Kemampuan Superdelokali- sasi).....	53
5.6	Hubungan Data Eksperimen dengan Hasil Perhitungan.....	55

BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	64
6.1 Kesimpulan	64
6.2 Saran	64
DAFTAR PUSTAKA	65
LAMPIRAN	67



DAFTAR GAMBAR

	Halaman
GAMBAR 2.1 Diagram tingkat energi HMO	9
GAMBAR 2.2 Penggambaran grafik dari energi HMO untuk beberapa sistem monosiklik	15
GAMBAR 2.3 Orbital-orbital π benzena	16
GAMBAR 4.1 Tingkat Energi HMO untuk Hidrokarbon : (a) Trifenilena, (b) Krisena	33
GAMBAR 4.2 Tingkat Energi HMO untuk Hidrokarbon : (c) 3,4-benzfenantrena, (d) Tetrafena	34
GAMBAR 4.3 Tingkat Energi HMO untuk Hidrokarbon : (e) Tetrasena, (f) Pirena	35



DAFTAR TABEL

	Halaman
TABEL 2.1 Parameter h dan k untuk Heteroatom dalam Penggunaan dengan Teori LCAO Sederhana	24
TABEL 4.1 Harga-harga Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan, untuk beberapa molekul organik..	31
TABEL 5.1 Data-data Energi Elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa Krisena.....	42
TABEL 5.2 Data-data Energi elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa senyawa kuinon.....	43
TABEL 5.3 Data-data Energi elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa Tetrafena.....	44
TABEL 5.4 Data-data Energi elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa Tetrafena.....	45
TABEL 5.5 Data-data Energi elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa Tetrasena.....	46
TABEL 5.6 Data-data Energi elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa Tetrasena-5,12-kuinon.....	47
TABEL 5.7 Data-data Energi elektron- π (E_π) dan Valensi Bebas (F_r) hasil perhitungan untuk sintesa Tetrasenkuinon dan Tetrafenkuinon....	48
TABEL 5.8 Harga σ untuk Substitusi Aromatik Elektrofilik	55
TABEL 5.9 Kuantitas dalam Aproksimasi Molekul Terisolasi	56
TABEL 5.10 Reaktifitas Relatif Hidrokarbon terhadap CCl_4	57

DAFTAR GRAFIK

	Halaman
GRAFIK 5.1 Hubungan antara σ (hasil eksperimen) dengan F (hasil perhitungan), dengan persamaan regresi $\sigma_r = 98,368 F_r - 43,165$	58
GRAFIK 5.2 Hubungan antara $\log k$ (hasil eksperimen) dengan F (hasil perhitungan), dengan persamaan regresi $\log k = 43,743 F_r - 21,517$..	59

