

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang Permasalahan

Untuk mempelajari reaktifitas kimia dari suatu molekul organik, bisa dilakukan dengan cara eksperimen ataupun secara teoritis. Untuk cara yang pertama dapat dilakukan dengan mereaksikan senyawa tersebut, misalnya dengan suatu elektrofil, kemudian hasil reaksinya diperiksa dengan menggunakan spektrofotometer. Di sini akan didapatkan pola spektrum dari hasil reaksi tadi, sehingga bisa diketahui elektrofil tersebut masuk pada posisi atom karbon yang mana dalam satu molekul, yang berarti posisi tersebut adalah posisi yang paling reaktif. Cara ini membutuhkan peralatan yang mahal harganya dan seringkali data spektrum yang diperoleh sukar diinterpretasikan, sehingga menjadi kendala dalam pelaksanaan penelitian.

Untuk menghindari hal ini, dilakukan dengan cara yang kedua, yaitu secara perhitungan teoritis. Cara ini ditempuh dengan menggunakan teori-teori yang telah banyak ditulis oleh banyak ilmuwan, seperti Lennard-Jones, Longuet-Higgins, Coulson, Wheland, Huckel dan masih banyak lagi. Dalam penelitian ini, digunakan teori yang dikemukakan oleh Hückel, yaitu Teori Orbital Molekul Hückel (HMO) Sederhana, karena teori ini cukup sederhana dengan hasil yang cukup

memuaskan, meskipun ada beberapa penyimpangan karena aproksimasi-aproksimasi yang dilakukannya. Perbaikan dari teori HMO sederhana ini bisa dilakukan dengan penambahan parameter lain seperti integral tolakan elektronik yang diselesaikan cukup rumit, bahkan kadang-kadang tidak mendapatkan hasil yang eksplisit.

Untuk menerapkan teori HMO Sederhana dalam studi sintesa molekul organik, mengalami beberapa hambatan. Hambatan yang utama adalah dalam menentukan diagram tingkat energi orbital molekul, yang penting dalam perhitungan indeks kereaktifan. Untuk mengatasi hal ini, telah digunakan bantuan Program Komputer TURBO BASIC.

## 1.2 Tujuan Penelitian

Untuk menyediakan data valensi bebas dari kelompok senyawa hidrokarbon aromatik bercincin empat dan senyawa-senyawa lain yang berhubungan dengan reaksi sintesanya. Dengan membandingkan data hasil perhitungan dan hasil eksperimen, bisa didapatkan batasan penggunaan Teori HMO Sederhana dalam studi kereaktifan molekul.

Dengan tersedianya data valensi bebas, bisa diperkirakan atom mana yang paling reaktif dalam satu molekul, sehingga bisa diramalkan kemungkinan sintesa molekul derivatnya.