

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Biomassa merupakan bahan organik yang dihasilkan melalui proses fotosintetik, baik berupa produk maupun buangan. Sumber energi biomassa mempunyai beberapa kelebihan antara lain merupakan sumber energi yang dapat diperbaharui sehingga dapat menyediakan sumber energi secara berkesinambungan [1]. Salah satu biomassa yang sedang dimanfaatkan sekarang adalah gliserol. Gliserol banyak digunakan untuk industri makanan, farmasi, kosmetik dan industri industri yang lain. Salah satu upaya untuk menambah nilai ekonomi *crude* gliserol adalah mengkonversinya menjadi produk kimia. Konversi gliserol menghasilkan produk kimia yaitu asetaldehid, acrolein, metanol, alil alkohol, formaldehid, etanol, dan propionaldehid [2]. Alil alkohol hasil konversi gliserol ini dapat disintesis dengan bantuan katalis menjadi produk kimia penting seperti 4-hidroksi butanal, γ -butirolakton, dan poli-4-hidroksi butirat.

Salah satu penelitian yang dilakukan oleh *John G. Zajacek* dan *Wilfred W. Shum* yang dipublikasikan pada tahun 2000 dapat menghasilkan 4-hidroksi butanal dari hasil reaksi alil alkohol dengan karbon monoksida dan hidrogen. Reaksi hidroformilasi alil alkohol tersebut menggunakan katalis rodium dan fosfin trialkil. Hidroformilasi alil alkohol menjadi 4-hidroksi butanal juga banyak dilakukan dengan menggunakan katalis Tetrakarbonil hidrida kobalt ($\text{HCo}(\text{CO})_4$).

4-hidroksi butanal atau nama lainnya 4-hidroksi butiraldehida dapat digunakan sebagai prekursor untuk mensintesis asam suksinat. Melalui reaksi hidrogenasi alkohol, dari 4-hidroksi butanal akan diperoleh 1,4-butanediol. Kedua senyawa tersebut baik asam suksinat maupun 1,4-butanediol merupakan senyawa penting dalam industri kimia.

Hidroformilasi ditemukan oleh *Otto Roelen* pada tahun 1938 selama penyelidikan tentang asal-usul produk oksigen yang terjadi pada reaksi *Fischer-Tropsch* dengan katalis kobalt. Pengamatan *Roelen* bahwa etilena, H_2 dan CO dikonversi menjadi propanal, dan pada tekanan yang lebih tinggi menjadi dietil

keton, menandai awal hidroformilasi. Penelitian *Roelen* tentang hidroformilasi melibatkan penggunaan garam kobalt.

Tetrakarbonil hidrido kobalt ($\text{HCo}(\text{CO})_4$), logam transisi yang banyak digunakan di industri. Pada tahun 1953 diungkapkan bahwa $\text{HCo}(\text{CO})_4$ adalah katalis aktif untuk konversi alkena atau alkohol, CO dan H_2 menjadi aldehid, yang dikenal dengan proses hidroformilasi [3]. Tercatat aldehid yang dihasilkan dari konversi alkena oleh katalis $\text{HCo}(\text{CO})_4$ adalah sekitar 100.000 ton/tahun.

Banyak penelitian hidroformilasi alil alkohol yang telah dilakukan dengan menggunakan katalis logam yang menghasilkan 4-hidroksi butanal sebagai hasil utama maupun hasil samping [3]. Penelitian tersebut dilakukan dengan metode basah yang artinya dilakukan di laboratorium menggunakan bahan dan alat skala laboratorium. Melihat dari hal tersebut penelitian mengenai hidroformilasi alil alkohol yang telah ada terutama yang menghasilkan 4-hidroksi butanal terkatalis kobalt dapat dilakukan secara komputasi. Penelitian secara komputasi ini sangat penting dilakukan, karena hasil penelitian dengan metode komputasi dapat dijadikan sebagai acuan atau gambaran awal untuk penelitian skala laboratorium basah.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka permasalahan yang perlu dirumuskan adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana menentukan struktur-struktur hipotesis katalis, reaktan, zat antara, dan produk dalam mekanisme hidroformilasi alil alkohol terkatalis $\text{HCo}(\text{CO})_4$ untuk memperoleh 4-hidroksi butanal yang dapat diterima secara teoritis?, dan
2. Bagaimana menentukan diagram tingkat energi dalam mekanisme hidroformilasi alil alkohol terkatalis $\text{HCo}(\text{CO})_4$ untuk memperoleh 4-hidroksi butanal?

1.3 Ruang Lingkup Penelitian

Perhitungan struktur-struktur hipotesis reaktan, zat antara, produk, dan keadaan transisi dalam mekanisme hidroformilasi ini menggunakan metode teori fungsi rapatan (DFT)/B3LYP dengan basis set 6-31G(d,p) untuk semua atom. Mekanisme hidroformilasi ini terdiri dari 6 tahap reaksi, yaitu pembentukan spesi aktif $\text{HCo}(\text{CO})_3$, koordinasi ikatan rangkap alil alkohol menuju $\text{HCo}(\text{CO})_4$, penyisipan-1,2 alil alkohol, karbonilasi, adisi oksidatif, dan eliminasi reduktif untuk memperoleh 4-hidroksi butanal.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan latar belakang dan rumusan masalah yang diajukan, tujuan dilakukannya penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Menentukan struktur-struktur hipotesis katalis, reaktan, zat antara, dan produk dalam mekanisme hidroformilasi alil alkohol terkatalisis $\text{HCo}(\text{CO})_4$ untuk memperoleh 4-hidroksi butanal yang dapat diterima secara teoritis, dan
2. Menentukan diagram tingkat energi dalam mekanisme hidroformilasi alil alkohol terkatalisis $\text{HCo}(\text{CO})_4$ untuk memperoleh 4-hidroksi butanal.

1.5 Manfaat Penelitian

Penulis mengharapkan dari hasil penelitian studi komputasi mekanisme reaksi hidroformulasi alil alkohol untuk mendapatkan 4-hidroksi butanal ini dapat bermanfaat bagi peneliti sebagai acuan atau gambaran awal untuk penelitian skala laboratorium basah, karena telah banyak penelitian hidroformilasi alil alkohol yang telah dilakukan dengan menggunakan katalis logam yang menghasilkan 4-hidroksi butanal. Penelitian tersebut dilakukan dengan metode basah yang artinya dilakukan di laboratorium menggunakan bahan dan alat kimia skala laboratorium.



uin

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI
SUNAN GUNUNG DJATI
BANDUNG