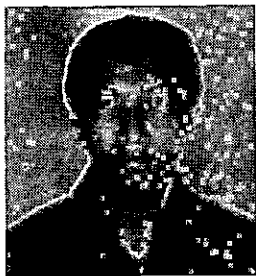


Ahmad Sahirul Alim



Otomatisasi Penentuan Rumusan Molekul Organik CHO dengan Komputer

Intisari

Dibuat program komputer dalam bahasa Pascal untuk menentukan rumus molekul organik CHO dari data berat dan berat molekul senyawa, dan berat sesuatu produk yang sesuai pada perubahan kimia senyawa yang dikehendaki. Untuk menghemat jumlah byte yang diperlukan, perhitungan tidak dijalankan melalui penentuan rumus empiris terlebih dahulu, tetapi langsung ke penentuan rumus molekul.

Pengantar

Rumus molekul merupakan informasi penting yang diperlukan dalam bidang-bidang sintesa kimia, kimia analisa, termodinamika kimia dan kinetika kimia. Satu cara penentuan rumus molekul yang terdiri atas C, H, O, N dan atau unsur-unsur lain adalah melakukan perubahan kimia senyawa asal, melakukan pengukuran kuantitatif terhadap produk yang sesuai dengan senyawa asal, dan menentukan berat molekul senyawa asal.

Biasanya perhitungan dijalankan dengan menentukan rumus empiris

terlebih dahulu, untuk kemudian data rumus empiris dan berat molekul dapat langsung memberikan informasi rumus molekul. Di dalam tulisan ini akan diajukan suatu cara penentuan yang lebih singkat karena langkah penentuan rumus empiris dapat ditiadakan sehingga lebih langsung menuju sasaran.

Dalam rangka efisiensi waktu dan tenaga, maka diperlukan otomatisasi perhitungan yang dapat dipenuhi oleh perangkat komputer lunak yang memerlukan langkah-langkah pemrograman dan perangkat keras untuk menjalankan program tersebut. Pemrograman akan dijalankan dengan bahasa Pascal, dan pokok fikiran yang diambil dari dalil disertasi (Djaka Sasmita, 1989) dan akan dimasukkan ke dalam komputer melalui disket adalah perhitungan rumus molekul secara langsung tanpa menentukan terlebih dahulu rumus empiris. Ini dikerjakan dalam usaha untuk menghemat jumlah byte yang diperlukan.

Metoda penentuan rumus molekul ini dapat pula dipandang sebagai

metoda alternatif dari metoda penentuan melalui rumus empiris.

Teori

Pada prinsipnya penentuan rumus molekul adalah menentukan jumlah atom setiap unsur senyawa dalam satu butir molekulnya, atau mol atom setiap unsur dalam satu mol molekulnya seperti ditunjukkan oleh subskrip atom dalam molekul. Jadi subskrip atom X yaitu x dalam molekul senyawa adalah mol X per mol senyawa, atau

$$x = \text{mol X} / \text{mol senyawa} \quad (1)$$

dan ini dapat langsung ditentukan jika mol X dan mol senyawa diketahui. Mol senyawa dapat dicari dengan persamaan.

$$\text{mol senyawa} = b/M \quad (2)$$

di mana b adalah gram senyawa sedangkan M adalah berat molekul senyawa. Mol X dapat ditentukan dengan mengubah senyawa secara kimia, sehingga dihasilkan suatu produk PX yang mengandung X yang dapat dipisahkan dan diukur beratnya yaitu b_{PX} dan mol PX adalah b_{PX}/M_{PX} .

subskrip X dalam PX, yaitu s_x dikalikan mol PX,

$$\text{mol X} = s_x b_{PX} / M_{PX} \quad (3)$$

dari persamaan (1) dan persamaan (3) didapatkan

$$x = (s_x) (b_{PX}/b) (M/M_X) \quad (4)$$

yang telah siap digunakan untuk menentukan subskrip atau indeks atom X dalam senyawa. Perlu diperhatikan bahwa jumlah atom dalam satu molekul adalah bilangan yang bulat karena dalam reaksi kimia

yang mengubah reaktan menjadi produk atom tidak dapat dibelah. Oleh karena itu jika ruas kanan persamaan (4) memberikan nilai pecah dari data eksperimen, maka harus dibulatkan terlebih dahulu menjadi bilangan bulat yang terdekat dengan pecahan itu. Pembulatan seperti ini dapat ilmu komputer dikenal sebagai rounding (Atkinson, 1985; Press dkk, 1987). Persamaan (4) akan diterapkan pada penentuan rumus molekul organik yang terdiri atas karbon, hidrogen dan oksigen, C,H dan O.

Perhitungan Penentuan Rumus C,H dan O.

Untuk menentukan rumus molekul organik C,H dan O maka berat b gram senyawa ini dibakar sempurna sehingga karbon C menjadi gas karbon dioksida yang dapat ditimbang beratnya b_{CO_2} gram dengan cara tertentu, dan hidrogen menjadi air H_2O yang juga dapat ditimbang beratnya dengan cara tertentu yaitu b_{H_2O} dan atom oksigen dalam senyawa semula tidak ditentukan kuantitasnya dengan eksperimen, karena data dianggap telah mencukupi, tetapi akan dihitung dengan rumus. Berat molekul M dari senyawa perlu juga ditentukan.

Sesuai dengan persamaan (4), maka jumlah atom C dalam setiap molekul senyawa c , dapat dihitung dengan rumus.

$$c = (b_{CO_2}/b) (M/44) \quad (5)$$

karena dalam hal ini $s_x =$ indeks C dalam $CO_2 = 1$, dan berat molekul CO_2 diambil sebagai 44 yaitu dengan

menggunakan pendekatan berat atom O sama dengan 16 dan berat atom C sama dengan 12.

Demikian pula, dari persamaan (4) dapat digunakan rumus untuk menentukan jumlah atom H dalam setiap molekul senyawa h,

$$h = 2(b_{H_2O}/b) (M/18) \quad (6)$$

karena dalam hal ini $s_x =$ indeks H dalam $H_2O = 2$, dan berat molekul H_2 diambil sama dengan 18 yaitu dengan menggunakan pendekatan berat atom O sama dengan 16 dan berat atom H sama dengan 1.

Jumlah atom O dalam setiap molekul senyawa o dapat dihitung melalui hubungan antara berat molekul dengan berat atom unsur-unsurnya yaitu.

$$M = 12c + h + 16o, \text{ atau}$$

$$o = (M - 12c - h)/16 \quad (7)$$

yang seperti halnya dengan c dan h memerlukan pula langkah pembulatan ke bilangan bulat terdekat dari ruas kanan persamaan terakhir.

Rumus langsung dari prinsip perhitungan ini dinyatakan sebagai dalil dalam disertasi (Djaka Sasmita, 1989).

Pemrograman

Dalam pemrograman akan digunakan perintah kepada komputer dengan bahasa Pascal sebagai berikut (Djaka Sasmita, 1989) :

1. write(sesuatu) berarti menyuruh komputer untuk menuliskan variabel yang dinamakan sesuatu di layar,
2. write(1st,sesuatu) berarti menyuruh komputer untuk menuliskan variabel yang dinamakan sesuatu dengan printer.
3. writeln(sesuatu) berarti menyuruh

komputer untuk menuliskan variabel yang dinamakan sesuatu di layar, dan tulisan ini diakui sebagai satu baris, artinya perintah menulis selanjutnya harus diletakkan pada baris berikutnya,

4. writeln(1st,sesuatu) berarti menyuruh komputer untuk menuliskan variabel yang dinamakan sesuatu dengan printer, dan tulisan ini diakui sebagai satu baris, artinya perintah menulis selanjutnya harus diletakkan pada baris berikutnya,

5. read(sesuatu) berarti menyuruh komputer untuk membaca sesuatu dari masukan melalui kunci (keyboard) dan menyimpan dari masukan melalui kunci (keyboard) dan menyimpan data itu dalam wadah (variabel) yang diberi nama sesuatu;

6. readln(sesuatu) berarti menyuruh komputer untuk membaca sesuatu dari masukan melalui kunci (keyboard) dan menyimpan data itu dalam wadah (variabel) yang diberi nama sesuatu; data ini diakui sebagai satu baris.

7. c := sesuatu berarti menyuruh komputer untuk mengisi variabel c dengan sesuatu yang dapat berupa hasil kali, jumlah selisih dsb;

8. round(c) berarti menyuruh komputer untuk membulatkan nilai c; round(c) adalah suatu fungsi yang tergantung kepada c;

9. tubuh program diawali dengan **Begin** dan diakhiri dengan **end** yang diteruskan dengan . menjadi **end**.

10. setiap pernyataan perintah selalu diakhiri dengan titik koma ; kecuali sebelum **end** tanda titik koma itu dapat ditiadakan.

Berdasarkan ini, maka tubuh program dalam bahasa Pascal untuk penentuan rumus molekul CHO dapat disusun sebagai berikut.

```

begin
write('Masukkan gram dan berat
molekul 'senyawa'); readln(b,M);
write('Masukkan gram CO2 dan gram
H2O); readln(bCO2,bH2O);
c := (bCO2/b)*(M/44);
  h := 2*(bH2O/b)*(M/18);
c := round(c); h := round(h);
o := (M - (12*c) - h)/16;
  o := round(o);
write('Rumus molekul adalah
C',c,'H',h,'O',o);
end.

```

Perintah writeln(lst,sesuatu) atau write(lst,sesuatu) digunakan jika kita ingin memberikan tampilan menggunakan printer.

Dalam program ini, data berat zat dimasukkan melalui kunci. Jika penimbangan menggunakan neraca listrik, maka data berat ini dengan suatu cara tertentu dapat masuk langsung tanpa melalui kunci sehingga

pekerjaan menjadi lebih otomatis.

Agar program ini dapat dimengerti oleh komputer maka masih diperlukan adanya kepala program yang menerangkan mengenai variabel-variabel dalam tubuh program. Dapat dilihat bahwa variabel yang ada dalam tubuh program adalah b,M, bCO₂,bH₂O yang merupakan bilangan real dan c,h, o yang merupakan bilangan bulat (integer).

Jadi kepala program dapat dituliskan sebagai berikut

```

Var
b,M,bCO2,bH2O : real;
c,h, o: integer;

```

Kesimpulan

1. Dalam menentukan rumus molekul C_cH_hO_o melalui reaksi pembakaran, maka perhitungan berikut mudah digunakan :

$$\begin{aligned}
c &= (\text{gram CO}_2 / \text{berat senyawa}) \\
&\quad (\text{berat molekul senyawa} / 44) \\
h &= (\text{gram H}_2 / \text{berat senyawa}) \\
&\quad (\text{berat molekul senyawa} / 18) \times 2 \\
o &= (\text{berat molekul senyawa} - 12c - h) / 16
\end{aligned}$$

Daftar Pustaka

Atkinson, K. 1985. **Elementary Numerical Analysis**. John Wiley and Sons, New York.

Djaka Sasmita, 1989. **Program Komputer dalam Bahasa Pascal**. Fakultas Tarbiyah IAIN Suka, Yogyakarta.

-----, 1989. **Daur-K untuk Menganalisa Keseimbangan Kimia-Fisika**. Disertasi Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
Press, W.H., Brian P.F., Saul, A.T., and William, T.V. 1987. **Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing**. Cambridge University Press, Cambridge.