

Dra. Asmara Sari Nasution, M.Si.

DASAR KIMIA ORGANIK TERAPAN



DASAR KIMIA ORGANIK TERAPAN

DASAR KIMIA ORGANIK TERAPAN

Dra. Asmara Sari Nasution, M.Si.



DASAR KIMIA ORGANIK TERAPAN

© Penerbit Perkumpulan Rumah Cemerlang Indonesia (PRCI)

Penulis:

Dra. Asmara Sari Nasution, M.Si.

Editor: Zufri Hasrudy Siregar

Cetakan Pertama: Maret 2024

Cover: Tim Kreatif PRCI

Tata Letak: Tim Kreatif PRCI

Hak Cipta 2024, pada Penulis. Diterbitkan pertama kali oleh:

Perkumpulan Rumah Cemerlang Indonesia
ANGGOTA IKAPI JAWA BARAT

Pondok Karisma Residence Jalan Raflesia VI D.151
Panglayungan, Cipedes Tasikmalaya – 085223186009

Website: www.rcipress.rcipublisher.org

E-mail: rumahcemerlangindonesia@gmail.com

Copyright © 2024 by Perkumpulan Rumah Cemerlang Indonesia
All Right Reserved

- Cet. I –: Perkumpulan Rumah Cemerlang Indonesia, 2024
Dimensi : 18,2 x 25,7 cm

ISBN 978-623-448-843-2

Hak cipta dilindungi undang-undang
Dilarang memperbanyak buku ini dalam bentuk dan dengan
cara apapun tanpa izin tertulis dari penulis dan penerbit

Undang-undang No.19 Tahun 2002 Tentang
Hak Cipta Pasal 72

Undang-undang No.19 Tahun 2002 Tentang Hak Cipta
Pasal 72

Barang siapa dengan sengaja melanggar dan tanpa hak melakukan perbuatan sebagaimana dimaksud dalam pasal ayat (1) atau pasal 49 ayat (1) dan ayat (2) dipidana dengan pidana penjara masing-masing paling sedikit 1 (satu) bulan dan/atau denda paling sedikit Rp.1.000.000,00 (satu juta rupiah), atau pidana penjara paling lama 7 (tujuh) tahun dan/atau denda paling banyak Rp.5.000.000.000,00 (lima miliar rupiah).

Barang siapa dengan sengaja menyiarkan, memamerkan, mengedarkan, atau menjual kepada umum suatu ciptaan atau barang hasil pelanggaran hak cipta terkait sebagai dimaksud pada ayat (1) dipidana dengan pidana penjara paling lama 5 (lima) tahun dan/atau denda paling banyak Rp.500.000.000,00 (lima ratus juta rupiah).

KATA PENGANTAR

Buku Referensi ini muncul sebagai hasil dari pengalaman saya lebih dari 20 tahun mengajar kimia kepada mahasiswa, biologi molekuler, dan ekologi di Fakultas Pertanian Universitas Al-Azhar Medan. Karena buku-buku besar kimia organik untuk ahli kimia tampaknya terlalu kompleks untuk Mahasiswa yang studinya hanya sebagian terkait dengan kimia, saya telah memutuskan untuk menyiapkan Buku Referensi yang lebih berorientasi pada esensi kimia organik.

Di sini, judul bab utama berisi jenis reaksi, tetapi subbab terkait senyawa kimia. Efek elektronik serta sifat ikatan kimia dijelaskan dengan menggunakan pendekatan kasualistik klasik dimulai dengan sifat gelombang elektron, dan membangun orbital molekul dari kombinasi linier orbital atom berdasarkan prinsip model MO kualitatif. Hibridisasi dihindari karena semua fenomena pada tingkat ini dapat dengan mudah dijelaskan oleh orbital molekul non-hibridisasi.

Buku ini dibagi menjadi dua bagian. Bab pertama membahas aspek-aspek mendasar dari teori struktural, dinamika reaksi organik, struktur elektronik, dan beberapa spektroskopi dasar. Terakhir, bab terbesar mewakili pengantar kimia organik produk alami. Sifat paling menarik dari sistem kimia organik, pembentukan keragaman struktur yang tinggi, ditunjukkan hampir di semua bab. Pendekatan ini dirancang untuk membantu siswa untuk memberikan wawasan yang lebih dalam fenomena evolusi kimia sebagai dasar untuk evolusi biologis.

Saya bermaksud buku ini untuk mahasiswa Pertanian, kedokteran, kehutanan, dan profesi lain di mana pengetahuan kimia organik memainkan peran penting. Saya juga berharap bahwa pekerjaan itu juga bisa menarik bagi non-profesional, serta para guru sekolah menengah.

Maret 2024
Penulis

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	i
DAFTAR ISI	ii
PENDAHULUAN	v
BAB 1 ALKANA, KOMPOSISI, KONSTITUSI DAN KONFIGURASI.....	1
1.1 Senyawa organik.....	5
1.2 Konfigurasi dan Bentuk Molekul.....	7
1.3 Dinamika dan Konformasi Molekul	10
1.4 Dinamika dan Konformasi Molekul	12
1.5 Sikloalkana	13
1.4.1 Sikloheksana	14
1.4.2 Siklopentana.....	15
1.4.3 Siklobutana dan Siklopropana.....	16
1.6 Hidrokarbon Polisiklik.....	17
BAB 2 KELOMPOK FUNGSIONAL.....	19
BAB 3 STRUKTUR ELEKTRONIK MOLEKUL ORGANIK	22
3.1 Ikatan Kovalen	22
3.2 Orbital Molekul.....	25
3.3 Distribusi Kerapatan Elektron, dan Bentuk Molekul.....	30
3.4 Panjang Ikatan, Energi Ikatan, dan Getaran Molekul.....	31
3.5 Menyimpulkan Struktur Molekul dengan Spektroskopi Resonansi Magnetik Nuklir.....	35
BAB 4 ALKENA DAN ALKUNA.....	40
4.1 Konstitusi dan Nomenklatur.....	40
4.2 Konfigurasi Alkena.....	41
4.3 Struktur Elektronik dan Reaksi Alkena.....	45
4.4 Reaksi Adisi Alkena, dan Konsep Mekanisme Reaksi	46
4.5 Penambahan Hidrogen Halida	48
4.6 Oksidasi dan Polimerisasi Alkena.....	53
4.7 Hidrokarbon aromatik	54

4.8 Hidrokarbon dalam Biologi.....	58
BAB 5 SUBSTITUSI PADA ATOM KARBON JENUH ALKIL HALIDA, ALKOHOL, TIOL, ETER, AMINA.....	59
5.1 Substitusi Radikal.....	59
5.1.1 Alkil Halida	59
5.1.2 Polaritas Ikatan dan Momen Dipol.....	63
5.2 Reaksi substitusi dan eliminasi nukleofilik.....	65
5.2.1 Mekanisme Reaksi Substitusi Nukleofilik.....	66
5.2.2 Alkohol	70
5.2.3 Eter	77
5.2.4 Tiol dan Sulfida	80
5.2.5 Amina.....	81
BAB 6 ADISI NUKLEOFILIK SENYAWA DENGAN GUGUS KARBONIL	85
6.1 Aldehida dan Keton	86
6.1.1 Karbon sebagai Nukleofil	91
6.1.2 Kondensasi dengan Amina.....	94
6.1.3 Pengurangan Aldehida dan Keton	94
6.2 Asam karboksilat.....	95
BAB 7 STEREOKIMIA, SIMETRI DAN KIRALITAS MOLEKULER.....	102
BAB 8 TURUNAN DARI ASAM KARBOKSILAT	110
8.1 Anhidrida.....	110
8.2 Ester, Substitusi Nukleofilik pada Atom Karbon Tak Jenuh	111
8.3 Asil, Halida.....	113
8.4 Amida	115
BAB 9 SUBSTITUSI ELEKTROFILIK REAKSI SENYAWA AROMATIK.....	118
9.1 Efek Substituen dalam Substitusi Aromatik Elektrofilik	120
BAB 10 SIKLOADISI.....	126
BAB 11 PRODUK ALAMI ORGANIK.....	128
11.1 Asam Amino dan Peptida.....	128
11.2 Karbohidrat	140
11.2.1 Struktur Siklik Monosakarida.....	145

11.2.2 Disakarida dan Polisakarida.....	148
11.3 Glikosida dan Nukleotida	149
11.4 Lipid 153	
11.4.1 Lilin	154
11.4.2 Lemak.....	154
11.4.3 Fosfolipid.....	156
11.4.4 Terpen dan steroid.....	158
11.5 Alkaloid.....	161
11.6 Reaksi Organik dan Bioorganik	162
INDEKS	168

PENDAHULUAN

Momen bersejarah ketika kimia organik muncul sebagai bagian dari kimia, di mana kimia organik berhubungan dengan senyawa yang berasal dari organisme hidup, sulit untuk ditetapkan. Lebih dari 200 tahun yang lalu, pada tahun 1784, T. Bergman menggunakan istilah *kimia organik* untuk pertama kalinya. Mungkin, dua peristiwa bersejarah dalam perkembangan kimia dapat dianggap penting untuk pengembangan cabang ilmu ini.

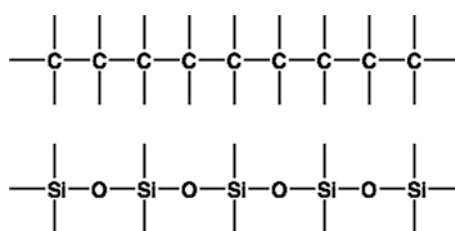
Pertama-tama orang harus menyebutkan **Jön Jacob Berzelius**, yang, pada awal abad kesembilan belas, mengembangkan metode untuk analisis unsur sistematis zat organik. Berzelius mengamati bahwa semua zat organik menghasilkan karbon dioksida dan air pada saat pembakaran. Dengan mengukur massa produk-produk ini secara akurat, ia menghitung persentase karbon, hidrogen, dan oksigen dalam senyawa organik. Kesimpulan yang paling penting adalah bahwa semua senyawa organik terdiri dari karbon dan hidrogen. Dengan demikian, kimia organik juga bisa disebut kimia senyawa karbon.

Kedua, mungkin peristiwa yang paling penting dalam pengembangan kimia organik adalah penemuan bahwa senyawa organik dapat dibuat dari bahan awal anorganik. Pada tahun 1828, **Friedrich Wöhler** berhasil menyiapkan urea, senyawa organik, dengan memanaskan garam anorganik amonium sianat. Sebelum penemuan ini, zat organik dianggap secara eksklusif berasal dari organisme hidup.

Salah satu pertanyaan mendasar dan umum tentang sifat senyawa organik adalah sifat khusus karbon sebagai elemen dasar dari mana semua zat organik dan semua zat Kehidupan yang dikenal dibangun. Mungkinkah silikon, misalnya, unsur yang berada dalam kelompok tabel periodik yang sama dengan karbon, menjadi unsur dasar untuk pengembangan beberapa kehidupan alternatif?

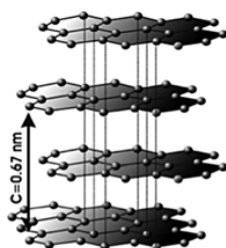
Untuk menjawab pertanyaan ini perlu untuk melihat sifat-sifat khusus dari unsur karbon, sifat-sifat yang bertanggung jawab untuk munculnya dan evolusi molekul organik kompleks. Kondisi prebiotik yang paling penting untuk awal evolusi biologis adalah munculnya campuran molekul yang kompleks dengan keragaman struktur yang tinggi. **Stuart Kauffman** menghitung bahwa keragaman kritis tersebut harus terdiri dari setidaknya 200.000 molekul dengan struktur yang berbeda. Sifat dasar karbon sedemikian rupa sehingga senyawa unsur ini dapat membentuk sejumlah besar struktur. Lebih dari sepuluh juta senyawa organik dikenal saat ini.

Pada paruh kedua abad kesembilan belas, **August Kekulé**, **Archibald Couper** dan secara independen **Aleksandr Butlerov** menemukan sifat karbon yang paling penting: saling mengikat atom karbon menjadi rantai, rantai bercabang dan struktur cincin. Penemuan ini telah diperluas dengan pengetahuan bahwa atom karbon dapat dihubungkan oleh ikatan tunggal, ganda dan rangkap tiga yang stabil. Sebagai perbandingan, atom silikon juga dapat dihubungkan oleh ikatan tunggal dan rangkap, tetapi berbeda dengan ikatan karbon-karbon, ikatan silikon-silikon lebih lemah, tidak stabil dan sensitif terhadap cahaya. Oleh karena itu, senyawa silaorganik tidak akan mampu bertahan hidup di bawah kondisi alam yang hadir di Bumi pada saat evolusi biologis dimulai. Namun, atom silikon membentuk ikatan yang kuat dengan atom oksigen dan membentuk keragaman struktur yang tinggi di mana motif struktural silikon-oksigen-silikon hadir. Struktur seperti itu adalah karakteristik dari dunia mineral terestrial.

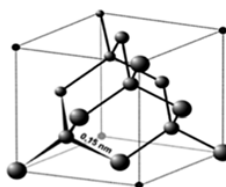


Kemudian dalam buku ini, kami akan memperkenalkan serangkaian sifat khusus lainnya yang membuat karbon menjadi elemen biogenik yang unik.

Struktur molekul organik dapat ditarik dari struktur di mana carbon muncul sebagai elemen yaitu dari struktur modifikasi alotropiknya. Sampai kuartal terakhir abad kedua puluh hanya dua modifikasi alotropik karbon yang diketahui, **grafit** dan **berlian**. Dari sudut pandang kimia organik struktural, struktur grafit dan berlian mewakili pattern struktural dasar dimana atom karbon dapat saling berhubungan.



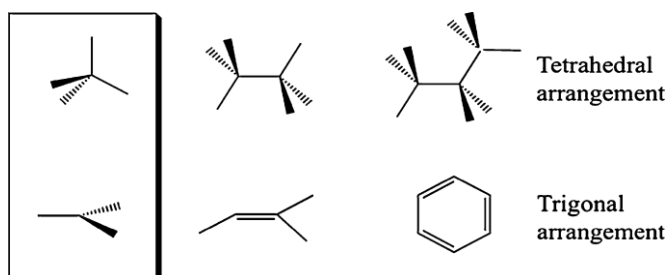
Graphite



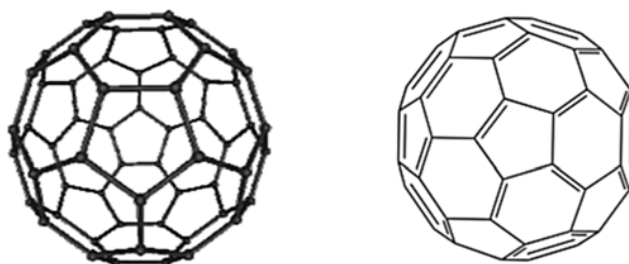
Diamond

Dalam grafit, setiap karbon dikelilingi oleh tiga atom karbon tetangga sedemikian rupa sehingga keempat atom terletak pada bidang yang sama. Sebaliknya, atom karbon dalam berlian disusun dalam array tiga dimensi di mana setiap atom

dikelilingi oleh empat tetangga, yang dikonfigurasi dalam geometri tetrahedral. Kedua motif ini, tetrahedral dan planar trigonal, masing-masing, mewakili pola struktural dasar molekul organik. Pengikatan linier atom juga dimungkinkan untuk molekul organik, tetapi modifikasi alotropik karbon dengan struktur seperti itu belum diamati.



Di ruang intergalaksi ada bintang-bintang yang berada dalam fase terakhir perkembangannya dan yang menghasilkan banyak unsur karbon oleh letusan. **Harold Kroto** dan kolaboratnya **Richard Smalley** dan **Robert Curl** telah menyelidiki secara rinci sifat karbon intergalaksi tersebut. Hasil penelitian mereka adalah penemuan modifikasi alotropik karbon baru di mana atom membentuk struktur menyerupai bola. Dengan mengukur massa molekul relatif dari molekul bola tersebut dan mensimulasikan kondisi antarbintang di laboratorium, Kroto, Smalley dan Curl telah menemukan bahwa molekul-molekul ini sebagian besar terdiri dari 60 gugus atom karbon yang didistribusikan sebagai struktur pentagonal dan heksagonal. Ada 12 segi lima yang dikelilingi oleh segi enam. Karena struktur yang diusulkan menyerupai beberapa karya seni, terutama arsitektur yang dibangun oleh arsitek **Richard Buckminster Fuller**, molekul C₆₀ ini diberi nama **fullerene**. Dalam penelitian selanjutnya serangkaian struktur mirip bola serupa ditemukan, beberapa di antaranya juga memiliki struktur tubular atom karbon. Molekul-molekul ini memiliki dimensi pada skala nanometer dan memiliki sifat menarik yang menarik untuk digunakan dalam teknologi canggih bahan baru dan elektronik. Penemuan fullerene merupakan awal dari era baru **nanoteknologi**.



FULLERENE

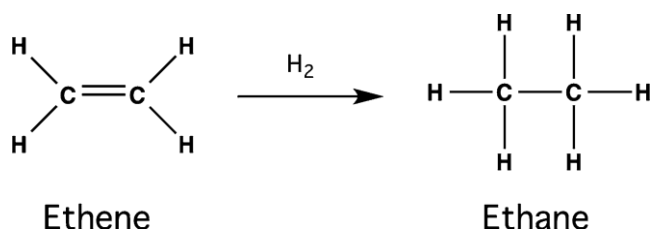
BAB 1

ALKANA, KOMPOSISI, KONSTITUSI DAN KONFIGURASI

Pada prinsipnya, molekul organik dapat dianggap terdiri dari kerangka hydrocarbon yang gugus fungsi terpasang. Sementara hidrokarbon skel-eton menentukan bentuk molekul dan fleksibilitas, reaktivitas kimia sebagian besar tergantung pada gugus fungsi yang ada. Untuk pemahaman yang lebih baik tentang sifat dasar dan struktur kerangka molekul, mari kita mulai dengan hidrokarbon, yang mewakili senyawa organik tanpa gugus fungsi.

Sebagai senyawa yang terdiri dari atom karbon dan hidrogen saja, hidrokarbon dapat dibagi dalam dua kategori utama, **jenuh**, yang terdiri dari alkana dan sikloalkana, dan tak jenuh, yang terdiri dari alkena, alkuna, dan aromatik. Istilah "jenuh" menunjukkan ketidakmungkinan menambahkan lebih banyak hidrogen ke molekul.

Dalam skema berikut, etena sebagai senyawa tak jenuh dapat diubah menjadi senyawa etana jenuh melalui proses pengikatan molekul hidrogen. Karena semua valensi atom karbon dalam etana ditempati, tidak ada tempat untuk menambahkan atom hidrogen lagi.

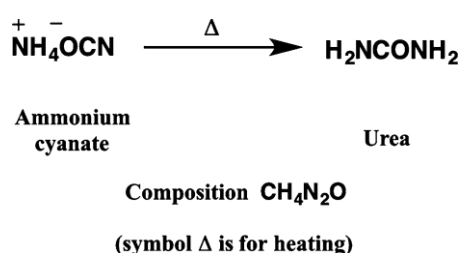


Alam berlimpah dalam hidrokarbon terutama dalam minyak mentah dan gas alam. Campuran hidrokarbon yang ada dalam minyak dapat dipisahkan menjadi kelompok senyawa dengan titik didih yang berbeda melalui proses industri distilasi fraksional. Dengan analisis senyawa dari fraksi yang berbeda adalah mungkin untuk menjelaskan komposisi elemental mereka dari mana pada gilirannya, rumus kimia mereka dapat dihitung, misalnya C_2H_6 untuk etana. Penentuan komposisi didasarkan pada sifat hidrokarbon untuk terbakar menjadi air dan karbon dioksida. Di awal abad kesembilan belas, **Jön Jacob Berzelius** menghitung rumus untuk serangkaian senyawa organik dari massa air dan karbon dioksida yang diukur.

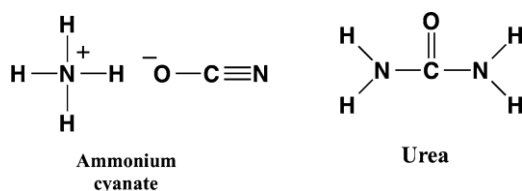
Meskipun pengetahuan tentang komposisi sangat penting untuk klasifikasi senyawa organik, untuk deskripsi molekul organik secara lebih rinci itu tetap tidak cukup.

Kesulitan muncul karena banyak senyawa organik yang berbeda memiliki komposisi yang sama. Teori atom yang dapat membantu menyelesaikan kontradiksi ini masih dalam tahap awal perkembangan pada saat itu. **John Dalton** telah menerbitkan penemuannya tentang atom hanya pada tahun 1808 dalam bukunya *The New System of Chemical Philosophy*. Lapisan kontroversi tambahan muncul selama waktu ini. Diyakini bahwa senyawa inor-ganic dan organik memiliki asal-usul alami yang berbeda. Oleh karena itu dianggap mustahil bahwa senyawa organik dapat dibuat dari sumber anorganik. Mereka, sehingga diperkirakan, dapat diperoleh secara eksklusif dari organisme hidup. Sudut pandang *vitalistik* ini dibantah oleh seorang mahasiswa Berzelius, **Friedrich Wöhler**, yang berhasil menyiapkan senyawa organik dari prekursor anorganik. Wöhler's organik com-

Pound urea, diperoleh dengan memanaskan garam anorganik amonium sianat:



Percobaan Wöhler penting bukan hanya karena temuannya bahwa hanya ada satu kimia, terlepas dari asal zat, anorganik atau biologis, tetapi karena menunjukkan bahwa dua zat yang sangat berbeda dapat memiliki komposisi yang sama, dalam hal ini $\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$. Gagasan **struktur** sebagai tingkat yang lebih tinggi dari prinsip pengorganisasian materi telah muncul. **Charles-Frédéric Gerhardt**, **August von Hofmann** dan **Alexander Williamson** telah sekitar tahun 1850 mengembangkan ide ini ke dalam konsep **konstitusi**, yang menggambarkan cara di mana atom saling terkait dalam molekul. Dalam percobaan Wöhler, *konstitusi* amonium sianat dan urea yang berbeda dapat dijelaskan dengan *rumus struktural* yang berbeda:



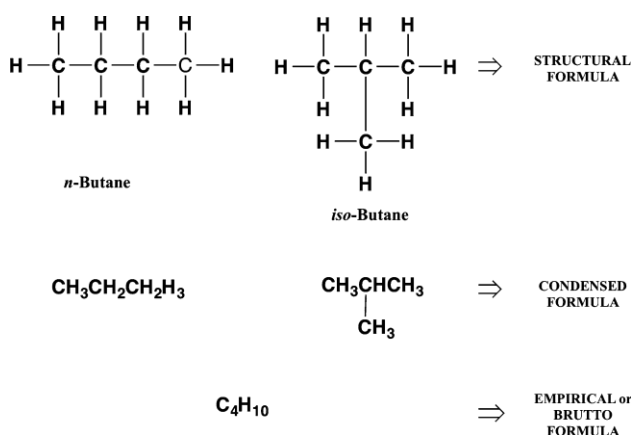
Senyawa seperti urea dan amonium sianat, yang memiliki komposisi yang sama tetapi konstitusi yang berbeda disebut **isomer**. Setelah contoh pertama ini telah ditemukan bahwa ada sejumlah besar isomer senyawa organik, terutama hidrokarbon, di alam. Sebelum mengklarifikasi konsep-konsep ini secara lebih rinci

Mari kita jelaskan komposisi, konstitusi, dan nama-nama beberapa hidrokarbon jenuh terpenting, **alkana**. Seperti dapat dilihat dari Tabel berikut, semua rumus kimia yang diberikan dapat direduksi menjadi rumus umum **C_nH_{2n+2}**, di mana **n** adalah bilangan bulat. Alkana semacam itu disebut n-alkana dan termasuk dalam **serangkaian senyawa homolog**.

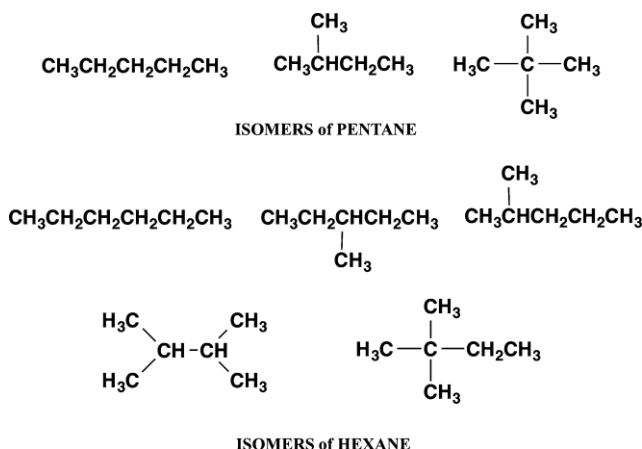
Methane	CH ₄	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	Hexane	C ₆ H ₁₄	$\begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$
Ethane	C ₂ H ₆	$\begin{array}{cc} & \text{H} & \text{H} \\ & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & \\ & \text{H} & \text{H} \end{array}$	Heptane	C ₇ H ₁₆	$\begin{array}{cccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$
Propane	C ₃ H ₈	$\begin{array}{ccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	Octane	C ₈ H ₁₈	$\begin{array}{ccccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$
Butane	C ₄ H ₁₀	$\begin{array}{cccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	Nonane	C ₉ H ₂₀	$\begin{array}{ccccccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$
Pentane	C ₅ H ₁₂	$\begin{array}{ccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	Decane	C ₁₀ H ₂₂	$\begin{array}{cccccccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & & & & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & & & & & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$

Isomer yang berbeda dimungkinkan jika molekul alkana mengandung lebih dari tiga atom karbon. Dalam kasus butana, yang memiliki komposisi yang ditentukan oleh rumus C₄H₁₀, atom karbon dapat saling berhubungan dalam dua cara berbeda membentuk dua isomer konstitusional. Sementara senyawa dengan rantai karbon linier biasanya disebut **n-butana**, **isomer bercabangnya disebut** iso-butana.

Struktur yang ditunjukkan dalam skema berikut adalah dua isomer berbeda yang benar-benar mewakili dua senyawa yang berbeda. Untuk mengubah satu isomer menjadi isomer lain, perlu untuk memutuskan dan mereformasi ikatan kimia dengan reaksi kimia. Isomer direpresentasikan dalam dua cara, oleh rumus struktural konektivitas di mana semua ikatan antaratom dan simbol atom ditunjukkan dan juga oleh rumus terkondensasi di mana rantai antara gugus CH₃ dan CH₂ ditarik. Formula yang lebih praktis seperti itu banyak digunakan dalam kimia organik. Kelompok-kelompok tertentu dalam rantai memiliki nama khusus seperti **gugus metilen** untuk CH₂ dan **gugus metil** untuk CH₃.



Mari kita perhatikan jumlah isomer alkana untuk jumlah atom karbon yang berbeda. Misalnya, pentana dapat membentuk tiga isomer dan heksana memiliki lima isomer:



Dalam tabel berikut, jumlah isomer diberikan untuk alkana dengan hingga 10 atom C. Tabel menunjukkan bahwa jumlah isomer meningkat secara eksponensial dengan jumlah atom karbon dalam molekul alkana. Hidrokarbon jenuh dengan 20 atom karbon dengan rumus brutto $\text{C}_{20}\text{H}_{42}$ dapat memiliki 366.319 isomer!

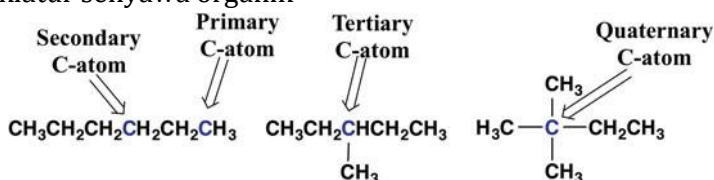
Jumlah atom C dalam alkana	Jumlah isomer konstitusional yang mungkin
1	1
2	1
3	1
4	2
5	3
6	5
7	9
8	18

9	35
10	75

Sejumlah besar isomer alkana sederhana menjelaskan mengapa karbon sebagai unsur itu unik dan mengapa ia berfungsi sebagai dasar bagi keragaman struktur yang diperlukan untuk Kehidupan. Kecenderungan untuk menghasilkan keragaman besar molekul organik mulai dari struktur sederhana akan dicontohkan lebih lanjut di bagian selanjutnya dari buku ini.

Mengenai isomer, harus dicatat bahwa tergantung pada cara atom saling berhubungan, atom-C dapat mengikat satu sama lain dalam beberapa cara yang berbeda. Beberapa karbon terikat hanya pada satu atom C tetangga, beberapa pada dua, tiga atau empat. Berdasarkan kriteria ini atom karbon diberi nama **primer**, **sekunder**, **tersier** dan **kuaterner**, masing-masing:

Pada nomenklatur senyawa organik



1.1 Senyawa organik

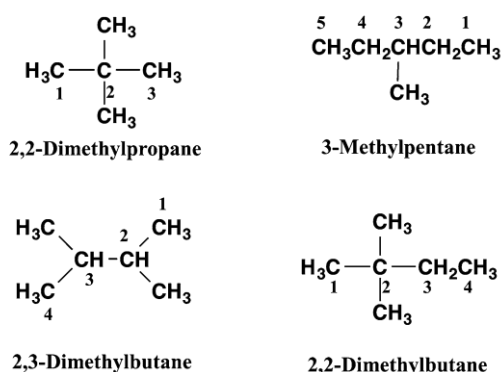
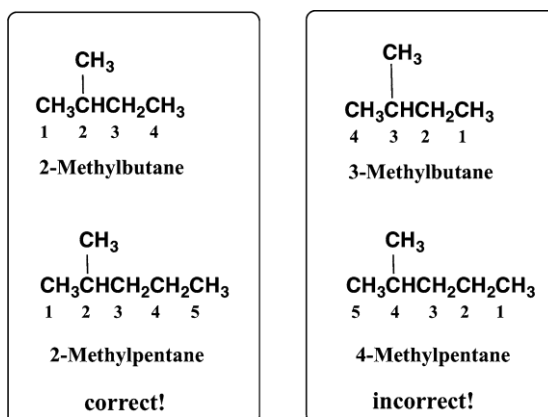
Ketika membahas kimia sebagai disiplin kita harus menyadari tiga kategori berbeda yang hadir dalam metodologi ilmu kimia dan praktek. Kimia dapat dikenali dari **isi**, tulisan, dan **bahasanya**. Yang paling penting adalah konten; Ini adalah zat yang dengannya kita memiliki pengalaman langsung baik di laboratorium atau dalam kehidupan sehari-hari. Tulisan kimia dan bahasa adalah penemuan manusia; Mereka adalah semacam model yang berfungsi untuk komunikasi yang kurang lebih tidak ambigu antara ahli kimia tentang zat, konsep kimia dan teori. Sementara penulisan kimia terdiri dari rumus yang telah kami sebutkan, dengan bahasa kimia kami menggambarkan konstitusi dan konfigurasi molekul.

Bahasa kimia dirancang agar cukup tepat sehingga dari nama senyawa hanya satu rumus struktural yang dapat disimpulkan. Nama-nama senyawa didasarkan pada aturan linguistik yang disebut **nomenklatur**. Saat ini, tata nama kimia bersifat universal, standar dan diatur oleh konvensi internasional yang diumumkan oleh International Union for Pure and Applied Chemistry (IUPAC). Menurut konvensi IUPAC, nama senyawa berasal dari akar kata yang awalan dan sufiksnya dapat ditambahkan, tergantung pada kelas dan struktur molekul. Akar nama didasarkan pada jumlah atom C dalam rantai karbon terpanjang dan berasal dari nama-nama hidrokarbon sederhana.

Akhiran memberi label gugus fungsi yang kehadirannya menempatkan molekul ke dalam kelas senyawa kimia yang sesuai. Dalam skema ini hidrokarbon jenuh, **alkana** memiliki akhiran **-ane**. Untuk penamaan isomer, sistemnya lebih rumit dan mencakup aturan tambahan. Karena molekul isomer bercabang, nama akar harus sesuai dengan rantai terpanjang. Sidechains diperlakukan sebagai kelompok tambahan yang disebut **substituen**. Dalam nama akhir struktur, substituen diperkenalkan sebagai awalan ke root. Nama-nama substituen dibentuk mengikuti aturan yang sama seperti dalam kasus alkana sederhana, yaitu jumlah atom C diikuti oleh akhiran **-yl**.

Angka Jumlah atom-C	Rumus	Akar	Akhiran	Nama senyawa	Substituen	Akhiran Nama
1	CH ₄	Bertemu-	-Ane	Metana	-CH ₃	-Yl Metil
2	C ₂ H ₆	Et-	-Ane	etana	-C ₂ H ₅	-Yl Etil
3	C ₃ H ₈	menopang-	-Ane	Propana	-C ₃ H ₇	-Yl Propil
4	C ₄ H ₁₀	Tapi-	-Ane	Butana	-C ₄ H ₉	-Yl Butil
5	C ₅ H ₁₂	Pent-	-Ane	pentana	-C ₅ H ₁₁	-Yl pentil
6	C ₆ H ₁₄	Hex-	-Ane	Heksana	-C ₆ H ₁₃	-Yl heksil
7	C ₇ H ₁₆	hept-	-Ane	Heptana	-C ₇ H ₁₅	-Yl heptyl
8	C ₈ H ₁₈	Oktober-	-Ane	Oktan	-C ₈ H ₁₇	-Yl oktil
9	C ₉ H ₂₀	bukan-	-Ane	Nonane	-C ₉ H ₁₉	-Yl Nonil
10	C ₁₀ H ₂₂	Desember-	-Ane	Dekana	-C ₁₀ H ₂₁	-Yl Desil

Posisi substituen pada rantai terpanjang diberi label dengan angka. Nomor 1 harus ditetapkan ke karbon terminal rantai sehingga semua substituen lainnya dapat diberi label dengan angka sekecil mungkin. Jika pada rantai dasar yang sama dua atau lebih substituen identik terpasang, akhiran diperluas dengan menambahkan label di-, tri-, dll. Misalnya, dalam nama 2,2-dimethylpropane (ditunjukkan dalam skema di bawah), penomoran 2,2- berarti bahwa dua gugus metil terikat pada karbon 2.

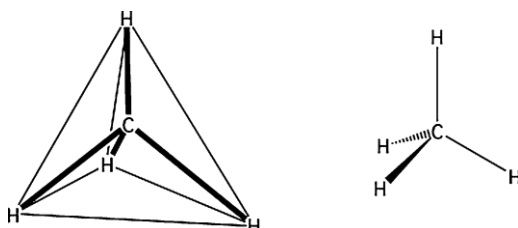


1.2 Konfigurasi dan Bentuk Molekul

Ide dasar bahwa molekul adalah partikel nyata yang memiliki bentuk tertentu berasal dari tiga ahli kimia, salah satunya organik, yang lain anorganik dan yang ketiga adalah ahli kimia fisik. Dengan mempelajari simetri kristal garam organik amonium-natrium tartarat, yang telah diisolasi dari campuran reaksi dalam fermentasi alkohol, **Charles LeBel** yang bekerja dengan **Louis Pasteur** mengusulkan pada tahun 1874 bahwa atom-atom yang terikat pada atom karbon pusat dalam alkana tersubstitusi didistribusikan di ruang angkasa sehingga membentuk tetrahedron. Konfigurasi spasial tetrahedral seperti itu menyerupai distribusi atom-C dalam berlian. Rincian penemuan ini oleh LeBel akan dibahas nanti dalam buku ini. Gagasan yang sama tentang struktur tetrahedral dari molekul mirip alkana telah diusulkan secara independen oleh ahli kimia fisik **Jacobus van't Hoff**, yang mempelajari isomer alkana tersubstitusi. Konsep struktur spasial senyawa anorganik di mana atom-atom yang mengelilingi atom logam pusat membentuk oktahedron, diusulkan oleh ahli kimia anorganik **Alfred Werner**.

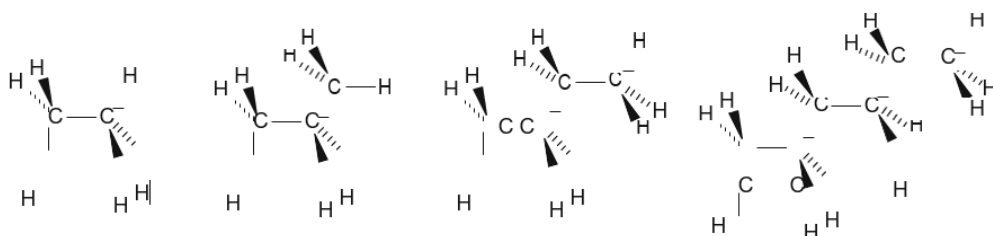
Molekul metana CH_4 , memiliki bentuk tetrahedron di mana atom karbon berada di pusat. Distribusi spasial tiga dimensi atom dalam molekul disebut **konfigurasi** dan kita dapat mengatakan bahwa molekul metana memiliki konfigurasi tetrahedral.

Untuk representasi bergambar dari distribusi spasial seperti itu ada konvensi sedemikian rupa sehingga ikatan kimia yang terletak pada bidang gambar diberi label dengan garis penuh, ikatan yang terletak di atas bidang gambar dengan irisan (segitiga memanjang tebal) dan ikatan di bawah bidang dengan garis putus-putus (putus-putus segitiga memanjang). Sudut antara dua ikatan C-H $109^{\circ}28'$, dikenal sebagai sudut tetrahedral.

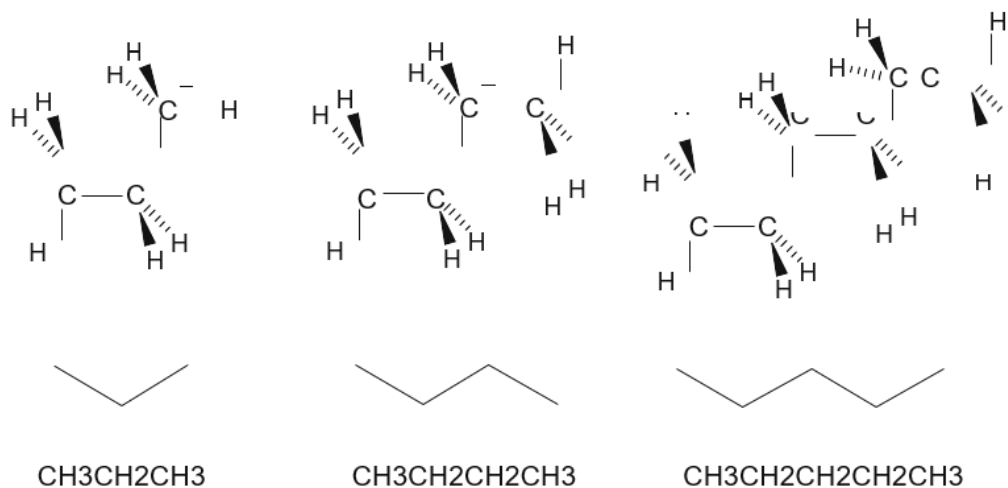


Fakta bahwa molekul memiliki bentuk geometris yang berbeda dapat dijelaskan oleh cabang fisika yang dikenal sebagai **mekanika kuantum**. Dengan kata lain, konfigurasi tetrahedral ikatan C-H adalah konsekuensi dari tolakan pasangan elektron yang cenderung terpisah sejauh mungkin satu sama lain. Metode prediksi bentuk molekul ini dengan mempertimbangkan distribusi ikatan yang optimal (pasangan elektron ikatan) di mana tolakan elektron minimal, disebut **VSEPR (tolakan pasangan elektron kulit valensi)**. Meskipun metode ini banyak digunakan, dalam praktiknya kita harus menunjukkan bahwa prosedur ini adalah pendekatan yang disederhanakan yang hanya mampu memberikan gambaran perkiraan molekul.

Mari kita gunakan pengetahuan tentang bentuk tetrahedral untuk membangun struktur molekul alkana sederhana lainnya. Kami mengamati bahwa konsekuensi dari struktur tetrahedral adalah bentuk zig-zag dari rantai alkana. Rumus kimia dalam skema berikut disebut rumus wedge-dash.

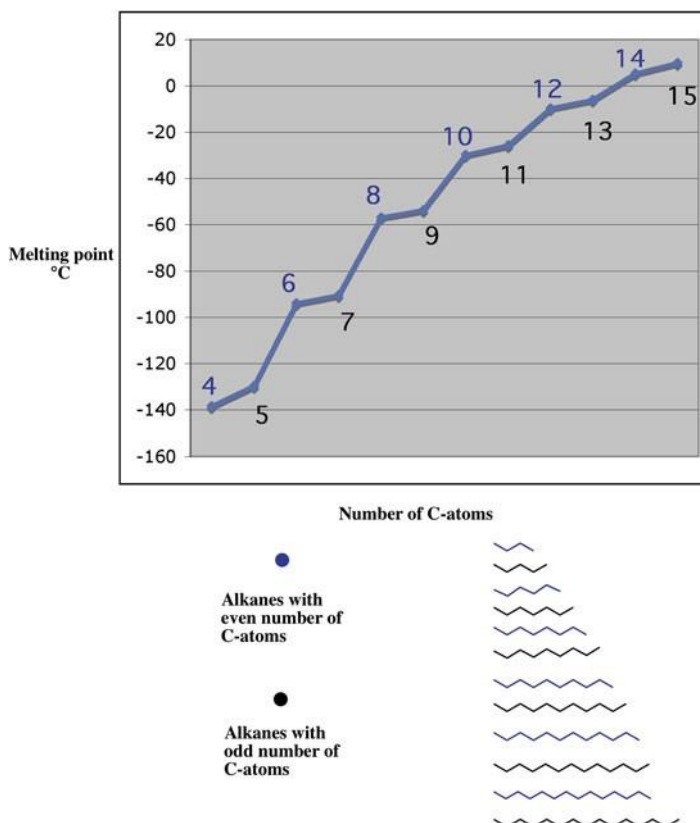


Dengan mengingat bentuk ini, dimungkinkan untuk menulis rumus struktural dalam bentuk yang lebih sederhana. Gambar di bawah ini menunjukkan struktur alkana, rumus strukturalnya yang disederhanakan serta rumus strukturalnya yang kental.



Meskipun disederhanakan, model geometri ini menjelaskan bentuk molekul cukup memuaskan untuk memberikan gambaran perkiraan molekul. Wawasan yang lebih rinci tentang bentuk molekul dimungkinkan dengan menggunakan teknik mikroskop khusus yang disebut **scanning tunneling microscopy (STM)** atau dengan perhitungan mekanika kuantum yang rumit dan canggih.

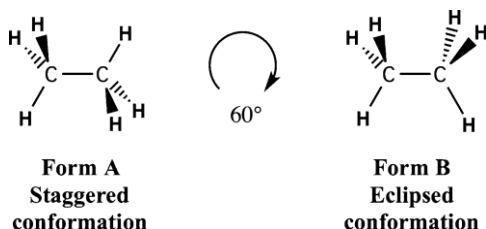
Sangat menarik untuk menyebutkan bahwa ada korelasi antara struktur molekul alkana dan beberapa sifat fisiknya. Dengan mengkorelasikan jumlah atom karbon dalam alkana sederhana dengan titik leleh dari senyawa yang sama, kita mengamati bahwa molekul dengan jumlah atom C ganjil dan molekul dengan jumlah atom C genap menunjukkan kurva korelasi yang berbeda.



Melihat struktur alkana pada gambar kita dapat melihat bahwa sementara molekul dengan jumlah atom karbon ganjil tampak simetris (baik ikatan karbon-karbon terminal berorientasi ke atas - garis hitam), di mana struktur dengan angka genap asimetris dalam arti bahwa ikatan karbon-karbon terminal berorientasi ke atas di ujung kiri rantai, tetapi ke bawah di ujung kanan (garis biru). Meskipun penjelasan yang benar tidak sederhana, contoh ini menunjukkan bagaimana sifat makroskopik berkorelasi dengan struktur mikroskopis. Kita dapat mengasumsikan bahwa molekul "ganjil" dalam keadaan terkondensasi akan dikemas secara berbeda dari molekul "genap".

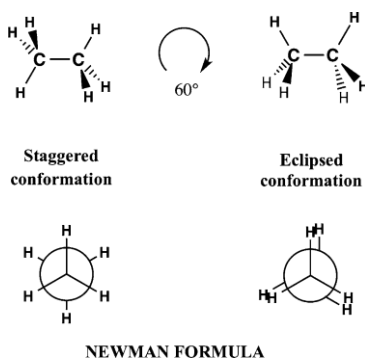
1.3 Dinamika dan Konformasi Molekul

Pertimbangan molekul alkana rantai panjang mengarah pada pertanyaan apakah molekul-molekul ini fleksibel? Untuk menganalisis fleksibilitas ini, mari kita ambil molekul etana sebagai contoh. Dimulai dengan konfigurasi tetrahedral, molekul etana dapat direpresentasikan dalam dua cara berbeda:



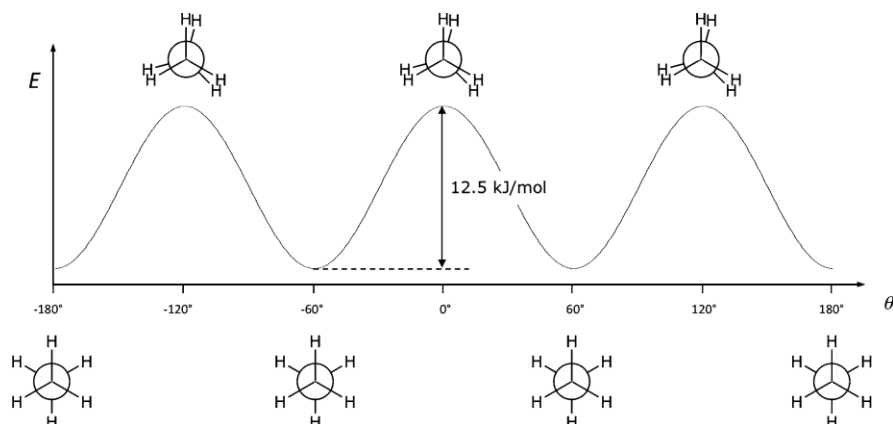
Bentuk A dapat diubah menjadi B hanya dengan rotasi salah satu gugus metil dengan sudut torsi $\Phi = 60^\circ$ di sekitar ikatan C-C. Rotasi seperti itu, terutama pada suhu kamar, sangat cepat dan dimungkinkan untuk membayangkan bahwa molekul etana dapat muncul dalam sejumlah besar bentuk, tergantung pada sudut rotasi Φ . Bentuk molekul yang berbeda seperti itu yang mengikuti dari rotasi internal tentang ikatan tunggal adalah: disebut **konformasi**. Pada gambar di atas dua konformasi yang paling penting: **stag-gered** dan **eclipsed** ditampilkan menggunakan notasi wedge-dash. Namun, konformasi ini juga dapat ditarik dengan memutar molekul sebesar 90° relatif terhadap bidang gambar. Dalam hal ini atom karbon muncul satu di belakang yang lain. Seperti yang ditunjukkan pada gambar berikut, atom karbon di depan dan di belakang dipisahkan oleh lingkaran. Representasi yang ditunjukkan dalam skema berikutnya disebut **rumus Newman**.

Formula Newman berfungsi untuk memperjelas perbedaan antara konformasi terhuyung-huyung dan terhalang. Dalam konformasi terhuyung-huyung, ikatan C-H pada atom carbon tetangga lebih dekat satu sama lain daripada di konformasi gerhana. Karena awan elektron dalam ikatan kovalen ini bermuatan negatif, mereka mengarah pada interaksi tolak, sehingga konformasi gerhana memiliki energi potensial yang lebih tinggi daripada konformasi terhuyung-huyung. Kita dapat mengatakan bahwa ikatan C-H tetangga **sterik menghalangi** satu sama lain, yang memberikan molekul dalam konformasi gerhana energi potensial yang lebih tinggi.



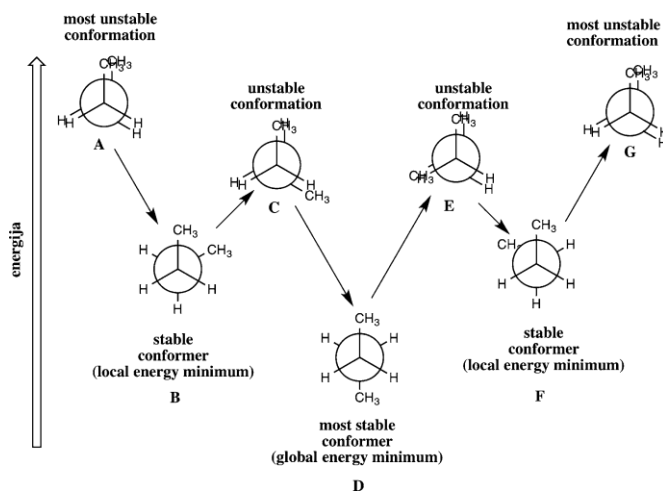
1.4 Dinamika dan Konformasi Molekul

Dimulai dengan konformasi gerhana, jika sudut torsi meningkat, energi potensial berkurang hingga sudut 60° , yang merupakan karakteristik untuk konformasi terhuyung-huyung. Ketergantungan energi potensial pada sudut torsi ditunjukkan dalam skema berikut.



Kita dapat mengamati bahwa energi potensial bervariasi secara berkala dengan sudut dan bahwa konformasi terhuyung-huyung selalu sesuai dengan minimal energi sementara konformasi gerhana selalu sesuai dengan maksimum energi. Karena alasan inilah molekul etana mengasumsikan konformasi yang terhuyung-huyung daripada yang terhalang.

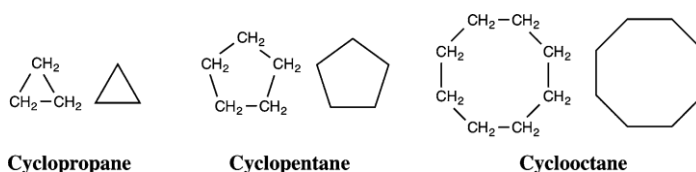
Konformasi stabil yang sesuai dengan minimal energi disebut **konformer**. Jika molekul terdiri lebih dari satu ikatan C-C, rotasi dimungkinkan di sekitar mereka semua dan jumlah konformer meningkat. Mari kita selidiki konformasi dan konformer molekul butana:



Dengan menyelidiki konformasi butana dan hanya mempertimbangkan rotasi di sekitar ikatan C-C pusat kita dapat melihat bahwa tiga konformer dimungkinkan (diberi label **B**, **D** dan **F** dalam skema di atas). Konformer yang paling stabil adalah **D** karena dalam hal ini gugus metil besar, yang memiliki awan elektron padat, berada pada jarak terbesar satu sama lain, yang membuat **hambatan sterik mereka** terkecil. Konformer **D** memiliki energi potensial terkecil dan kita dapat mengatakan bahwa itu sesuai dengan **minimum global** dari kurva energi potensial. Konformer **B** dan **F** yang kurang stabil berkorelasi dengan **minima lokal** kurva energi potensial. Transformasi dari satu konformer ke konformer lain hanya dimungkinkan dengan melewati energi potensial maxima **A**, **C**, **E** dan **G**, yang termasuk dalam konformasi yang dikalahkan. Ketika molekul menjadi lebih kompleks, jumlah konformer (minima energi lokal), serta jumlah maxima lokal (konformasi terhalang) menjadi lebih besar. Menjelajahi bentuk dan energi dari kemungkinan konformer dan energi konformasi gerhana memerlukan perhitungan khusus yang disebut **analisis konformasi**. Metode yang paling sederhana dan paling sering digunakan didasarkan pada model mekanis di mana atom didefinisikan sebagai titik massa dan ikatan kimia diperlakukan sebagai konektor elastis. Dengan menggunakan model ini dimungkinkan untuk menghitung energi minima dan maxima. Metode ini disebut **mekanika molekuler**.

1.5 Sikloalkana

Gagasan bahwa atom karbon dapat terikat dalam struktur siklik (selain membentuk rantai dan rantai bercabang) muncul selama paruh kedua abad kesembilan belas. Ketika struktur siklik ini adalah hidrokarbon jenuh, kita berbicara tentang **sikloalkana**. Dalam nomenklatur kelas senyawa ini, namanya dibentuk dengan menambahkan awalan **cyclo-**.

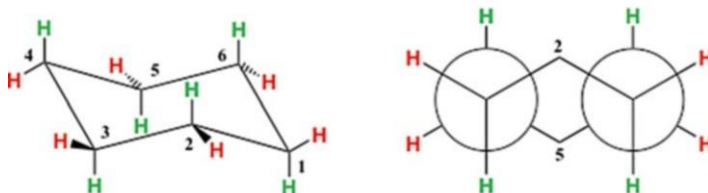


Konfigurasi sikloalkana didasarkan pada kombinasi tetrahedron, mirip dengan kasus alkana. Namun, dalam beberapa kasus struktur cincin mensyaratkan bahwa sudut antara ikatan C-C menyimpang dari nilai tetrahedral normal ($109^\circ 28'$). Sudut tetrahedral yang hampir ideal hadir dalam molekul sikloheksana. Untuk representasi bergambar dari struktur molekul tiga dimensi siklik

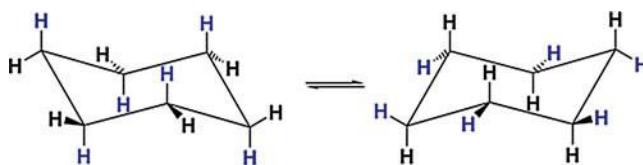
Molekul proyeksi deskriptif khusus digunakan. Mari kita menganalisis struktur molekul sikloheksana secara lebih rinci.

1.4.1 Sikloheksana

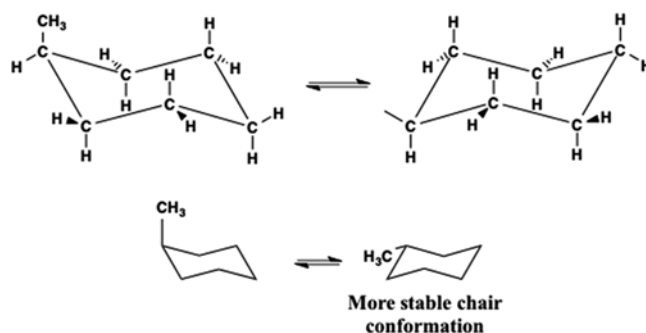
Seperti yang dapat kita lihat dalam skema berikut, atom hidrogen dapat terikat pada karbon dengan dua cara berbeda. Ketika ikatan C-H (mengandung atom H hijau) sejajar dengan sumbu tegak lurus terhadap bidang cincin, hidrogen dalam ikatan tersebut disebut **hidrogen aksial** (ditunjukkan dengan warna hijau). Hidrogen yang ditarik merah terletak hampir di bidang khatulistiwa cincin dan disebut **atom hidrogen khatulistiwa**. Perbedaan antara jenis hidrogen ini lebih baik diwakili dengan menggunakan rumus Newman:



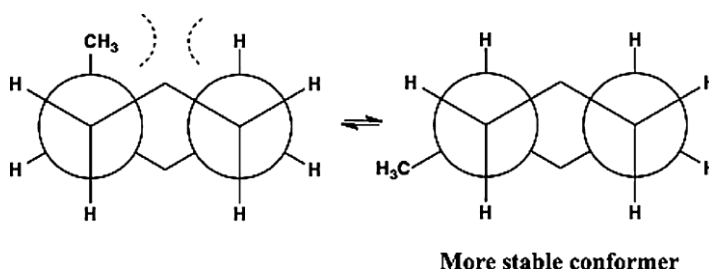
Rumus Newman yang ditunjukkan pada skema atas (kanan) diperoleh dengan melihat sepanjang ikatan C3-C4 dan C1-C6. Setelah diperiksa, menjadi jelas bahwa konformasi yang tercela memiliki bentuk yang terhuyung-huyung dan bahwa ini adalah konformer yang stabil. Dengan konvensi mereka disebut **ketua konformer**. Karena semua ikatan C-C berada dalam susunan terhuyung-huyung, molekul sikloheksana adalah hidrokarbon siklik yang paling stabil. Tidak ada ikatan C-H yang secara sterik saling menghalangi. Dinamika konformasi cincin sikloheksana melibatkan rotasi terbatas di sekitar ikatan C-C: satu konformer kursi diubah menjadi yang lain.



Atom hidrogen (biru) yang berada di posisi aksial dalam satu konformer muncul di posisi khatulistiwa dalam konformer produk. Perubahan seperti itu dari posisi aksial ke posisi khatulistiwa bahkan lebih jelas dalam sikloheksana tersubstitusi metil.



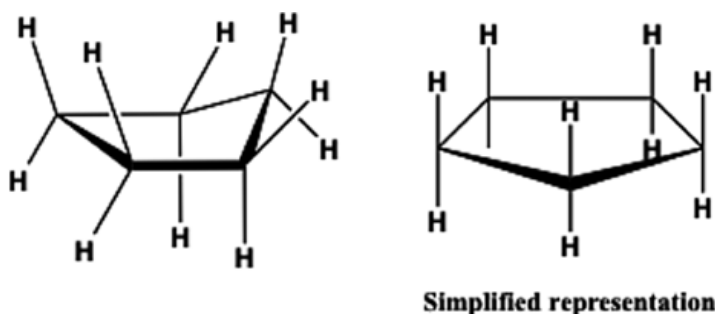
Gugus metil berada pada posisi aksial pada konformer pertama dan pada posisi khatulistiwa pada konformer kedua. Kedua konformer juga dapat diwakili oleh rumus Newman:



Pada konformer kiri (skema di atas) gugus metil aksial dekat dengan ikatan C-H aksial terdekat. Karena awan elektron dari dua kelompok aksial ini saling tolak, molekul memiliki energi tinggi dan menjadi kurang stabil. Seperti yang telah kita bahas, interaksi yang tidak menguntungkan seperti itu disebut hambatan sterik. Pada konformer di sebelah kanan, gugus metil berada di posisi khatulistiwa, hambatan sterik tidak ada dan konformer lebih stabil. Ini adalah penjelasan dari aturan umum yang menurutnya konformer sikloheksana dengan substituen besar di posisi khatulistiwa lebih stabil daripada konformer dengan gugus di posisi aksial.

1.4.2 Siklopentana

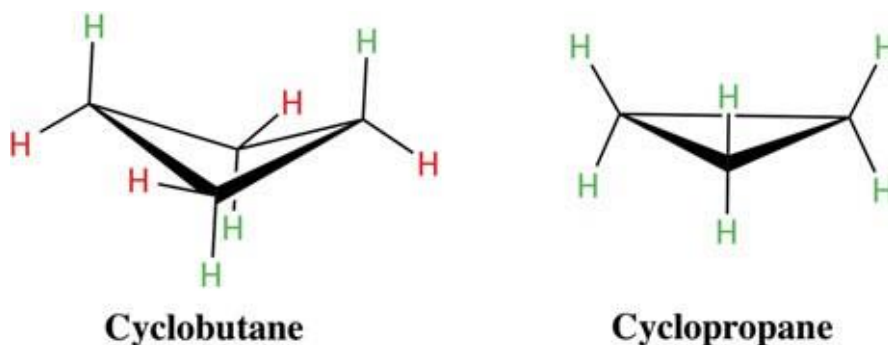
Berbeda dengan sikloheksana, molekul siklopentana hampir planar. Sementara empat atom karbon terletak di bidang molekul, atom kelima sedikit terdistorsi keluar dari bidang. Dinamika konformasi cincin siklopentana hampir dapat diabaikan dan melibatkan pengangkatan atom-C secara berurutan. Molekul dalam gambar berikut diwakili dalam dua cara, deskripsi akurat di sisi kiri dan disederhanakan di sebelah kanan.



Karena semua atom hidrogen adalah kuasi-aksial, representasi molekul siklopentana oleh cincin planar adalah deskripsi yang dapat diterima.

1.4.3 Siklobutana dan Siklopropana

Sementara sudut di sekitar atom karbon dalam sikloheksana dan siklopentana tidak menyimpang banyak dari sudut tetrahedral dalam molekul cincin kecil seperti siklobutana atau siklopropana, geometri mensyaratkan bahwa sudut antara ikatan C-C tetangga menyimpang secara signifikan dari nilai tetrahedral. Pengurangan paksa sudut tetrahedral seperti itu membutuhkan energi potensial tambahan. Akibatnya, molekul siklik kecil seperti siklopropana mengandung **energi regangan potensial berlebih** yang disebut **strain Bayer**. Karena strain ini, molekul dengan cincin beranggota tiga dan empat aktif secara kimiawi dan dalam reaksi kimia cincin cenderung membelah dan mengurangi kelebihan energi potensial.



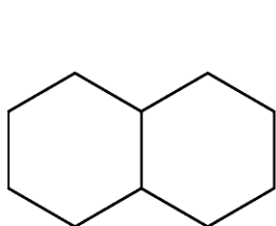
Molekul siklobutana tidak planar dan atom karbon menyimpang dari bidang dengan membentuk struktur di mana empat atom hidrogen memiliki posisi khatulistiwa (diberi label merah) dan empat hidrogen sisanya aksial (diberi label hijau). Dengan cara ini strain Bayer diminimalkan. Dalam siklopropana, semua hidrogen berada dalam posisi kuasi-aksial.

Dari studi rinci dari molekul siklopropana, telah ditemukan bahwa ikatan C-C dilipat yaitu kerapatan elektron maksimum antara atom karbon terikat terletak

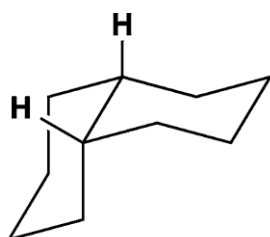
pada sumbu ikatan C-C.

1.6 Hidrokarbon Polisiklik

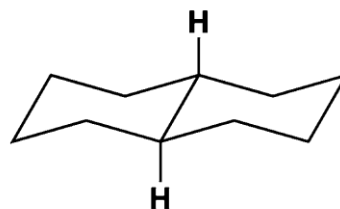
Atom karbon juga dapat saling berhubungan dalam struktur yang memiliki lebih dari satu cincin. Mereka disebut **hidrokarbon polisiklik**. Salah satu struktur polisiklik terkenal yang muncul dalam serangkaian produk alami adalah **dekalin**, dengan dua cincin beranggota enam yang kental. Istilah "kental" berarti bahwa cincin berbagi satu ikatan C-C. Karena ada dua posisi hidrogen yang berbeda pada ikatan C-C yang umum ini, molekul dekalin dapat muncul sebagai dua stereoisomer. Hidrogen tetangga dapat berada di sisi yang sama atau di sisi berlawanan dari ikatan C-C bersama dan stereoisomer masing-masing dikenal sebagai **cis-dekalin** dan **trans-dekalin**. Seperti yang diharapkan, isomer memiliki sifat fisik yang berbeda. Titik lebur *cis-dekalin* adalah 198°C dan titik leleh *trans-dekalin* adalah 185°C .



Decaline



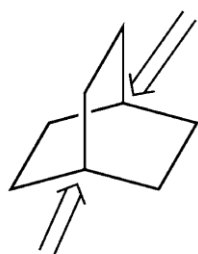
cis-Decaline



trans-Decaline

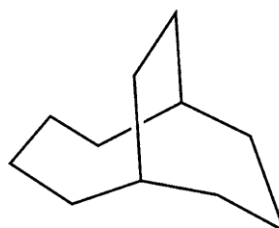
Dalam nomenklatur kimia, hidrokarbon polisiklik diberi nama sesuai ukuran jembatan. Atom karbon yang dimiliki oleh dua cincin yang berbeda disebut **bridgehead** tetapi mereka tidak membentuk bagian dari jembatan. Akhiran **bicyclo-** digunakan jika ada dua cincin dan jumlah atom C pada jembatan ditambahkan dalam tanda kurung.

Bridgehead carbon atom



Bridgehead carbon atom

Bicyclo[2.2.2]octane



Bicyclo[4.3.2]undecane