

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Kehidupan manusia pada dasarnya tidak dapat terlepas dari kimia (Sari & Hidayat, 2017). Ilmu kimia merupakan cabang dari sains yang berkaitan dengan sifat materi, struktur materi, perubahan materi, hukum-hukum dan prinsip-prinsip yang menggambarkan perubahan materi, serta konsep-konsep dan teori-teori yang menafsirkan perubahan materi (Slaubaugh & Parsons, 2000:21). Salah satu karakteristik ilmu kimia adalah sebagian besar konsep-konsepnya bersifat abstrak (Kean & Middlecamp, 2001:13). Selain sifatnya yang abstrak, kesulitan mempelajari kimia juga disebabkan oleh kompleksnya perhitungan yang terlibat, bahasa yang jarang digunakan dalam kehidupan sehari-hari, serta perbedaan level-level representasi yang digunakan para ahli kimia dalam penerapan pembelajaran kimia (Gabel, 1993 dalam Sheppard, 2006:33).

Pembelajaran ilmu kimia mencakup tiga level representasi yaitu makroskopik, submikroskopik, dan simbolik (Johnstone dalam Chandrasegaran, 2007:31). Hal ini sejalan dengan pendapat Farida (2009) bahwa fokus studi pengembangan pendekatan belajar dan mengajar kimia lebih ditekankan pada tiga level representasi yakni: makroskopik, submikroskopik dan simbolik. Pernyataan serupa didukung pula oleh Bowen & Bunce (2002) yang mengungkapkan bahwa pemahaman konseptual dalam kimia melibatkan kemampuan untuk merepresentasikan dan menerjemahkan masalah kimia ke dalam bentuk representasi makroskopik, submikroskopik, dan simbolik.

Penyajian konsep kimia dengan tiga level representasi secara simultan merupakan aspek penting yang perlu diperhatikan dalam proses pembelajaran kimia. Namun, pembelajaran kimia umumnya cenderung membatasi pada level makroskopik saja, representasi submikroskopik dan simbolik cenderung diabaikan. Hal ini menyebabkan mahasiswa cenderung kesulitan untuk memahami konsep-konsep kimia yang kebanyakan bersifat abstrak. Hinton & Nakhleh (2002) dalam penelitiannya pada materi reaksi kimia, menyatakan bahwa tidak ada seorang partisipan pun yang menunjukkan pemahaman yang jelas pada karakteristik mikroskopik dari ion-ion poliatom serta terdapat partisipan yang memiliki beberapa kesalahpahaman pada aspek submikroskopik yang substansial pada reaksi kimia.

Pemanfaatan teknologi seperti kimia komputasi dapat menjadi solusi bagi permasalahan tersebut (Prianto, 2007:14). Saat ini kimiawan dapat menggunakan komputer untuk mengkaji struktur submikroskopik dan menganalisis sifat-sifat kimia zat lainnya (Chang, 2005:9). Metode kimia komputasi bersifat sangat fleksibel dan hampir semua materi praktek kimia baik level sederhana maupun dengan tingkat kesulitan tinggi dapat di modelkan dengan baik menggunakan kimia komputasi (Fortenberry, *et al*, 2015:11). Keuntungan lain penggunaan pemodelan kimia komputasi adalah biayanya murah, memiliki tingkat akurasi yang tinggi, mempersingkat waktu praktek, tidak berbahaya dan tentu dapat membantu meningkatkan pemahaman terhadap materi kimia secara optimal (Ochterski, 2014:14).

Kimia komputasi merupakan cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya (Prianto, 2007:22). Program untuk pemodelan kimia komputasi yang akan digunakan adalah *NwChem* (*Northwest Computational Chemistry Package*) versi 6.5. Selain mudah dipasang, *NwChem* memiliki kelebihan lainnya yaitu memiliki fitur lengkap (Hadisaputra, *et al*, 2017:43). Selain itu, *NwChem* dapat meramalkan struktur, kereaktifan, dan mekanisme reaksi serta dapat menentukan keadaan transisi dan energi pengaktifan/hambatan reaksiorganik (Ambarwati, *et al*, 2016:26).

Proses kegiatan pembelajaran kimia komputasi dapat membantu memodelkan konsep-konsep kimia yang sifat ke abstrakannya tinggi, seperti halnya pemodelan kimia komputasi pada struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik (Ambarwati *et al.*, 2016:33). Reaksi substitusi elektrofilik merupakan reaksi penggantian suatu gugus dengan gugus lain, dimana terjadi apabila gugus pengganti merupakan pereaksi elektrofil. Elektrofil merupakan spesi yang tertarik pada muatan negatif. Jadi elektrofil merupakan suatu asam Lewis. Pada umumnya, dalam reaksi substitusi elektrofilik yang disubstitusi adalah H^+ atau asam Lewis. Reaksi substitusi elektrofilik dapat terjadi pada senyawa benzena atau benzena tersubstitusi (Frieda dan Suja, 2004:25).

Pada saat pembelajaran berlangsung perlu adanya alat bantu yang disebut lembar kerja (LK) guna menunjang keterlaksanaan pembelajaran. Lembar kerja yang baik harus memenuhi kriteria persyaratan yang memuat komponen dibuat berisi prosedur yang dapat mengarahkan peserta didik dalam pembelajaran

(Trianto, 2009:11). Namun demikian, ternyata lembar kerja yang selama ini digunakan belum merangsang keterampilan proses sains pada peserta didik karena memuat prosedur yang sifatnya tertutup (Maryati, 2015:13). Oleh karena itu, diperlukan suatu lembar kerja yang dapat meningkatkan keterampilan proses sains, yang dituntut untuk mengembangkan keaktifan mahasiswa dalam memperoleh pengetahuan. Salah satu upaya untuk mengembangkan sikap ilmiah tersebut yaitu dengan menerapkan lembar kerja berbasis *POE (Predict, Observe, Explain)* dengan tujuan menjadikan mahasiswa aktif dan lebih kreatif serta dapat melatih keterampilan berpikir kritis pada mahasiswa.

Beberapa penelitian telah dilakukan terkait dengan pengembangan LK berbasis *POE*. Penelitian yang telah dilakukan oleh Syamsuri, Sulisetijono & Rahayu (2007:91) menunjukkan bahwa LK tersebut layak digunakan untuk mendukung pembelajaran dengan persentase nilai keefektifan sebesar 87,5% dengan kategori sangat baik. LK berbasis *POE* ini akan melatih siswa untuk menggunakan tiga langkah utama dari metode ilmiah yaitu (1) *prediction*, atau membuat prediksi; (2) *observation*, yaitu melakukan penelitian, pengamatan apa yang terjadi; (3) *explanation*, yaitu memberikan penjelasan (Mariyana, 2013:41).

Berdasarkan paparan di atas, dirasa penting untuk dilakukan penelitian untuk meningkatkan pemahaman pada konsep kimia khususnya pada materi reaksi substitusi elektrofilik benzena dengan tiga level representasi secara simultan melalui proses pemodelan struktur. Selain itu, akan dikembangkan juga lembar kerja pemodelan struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik benzena menggunakan *NwChem*. Berdasarkan lembar kerja tersebut akan disusun format

penelitian lembar kerja yang sesuai berdasarkan lembar kerja yang di kembangkan. Peneliti mencoba mengangkatnya melalui penelitian dengan judul **“Pengembangan Lembar Kerja *POE* untuk Pemodelan Reaksi Substitusi Benzena Berbasis Aplikasi *NwChem*”**.

B. Rumusan Masalah Penelitian

Berdasarkan latar belakang yang telah dikemukakan, maka rumusan masalah secara umum untuk penelitian ini adalah “Bagaimana pengembangan LK *POE* (*Predict, Observe, Explain*) pada pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem*”. Adapun rumusan masalah tersebut dirinci sebagai berikut:

1. Bagaimana tahapan pengembangan lembar kerja berbasis *POE* pada pemodelan reaksi substitusi benzena menggunakan aplikasi *NwChem* ?
2. Bagaimana hasil uji kelayakan lembar kerja berbasis *POE* pada pemodelan reaksi substitusi benzena menggunakan aplikasi *NwChem* ?
3. Bagaimana hasil analisis perhitungan untuk penentuan nilai ΔH reaksi substitusi benzena berdasarkan data hasil perhitungan *NwChem* ?

C. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas, maka tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Mengembangkan lembar kerja *POE* pada pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem*.
2. Menganalisis hasil uji validasi lembar kerja berbasis *POE* pada pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem*.

3. Menganalisis data hasil perhitungan *NwChem* untuk menentukan nilai ΔH reaksi substitusi benzena.

D. Manfaat Hasil Penelitian

Penelitian terhadap pengembangan lembar kerja berbasis *POE* ini diharapkan dapat memberikan manfaat sebagai berikut:

1. Dapat memberikan alternatif perangkat pembelajaran yang membantu, mempermudah dan meningkatkan mutu pembelajaran dalam proses belajar mengajar pada pemodelan kimia komputasi dan untuk membantu mahasiswa dalam pemahaman materi struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik benzena.
2. Dengan adanya lembar kerja berbasis *POE* pada pemodelan kimia komputasi akan mempermudah mahasiswa dalam menemukan dan memahami konsep kimia, serta memahami pembelajaran yang bermakna terutama pada materi struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik benzena.
3. Sebagai wawasan dalam melakukan penelitian lebih lanjut terhadap pengembangan LK *POE* pada pemodelan reaksi/molekul dengan materi yang berbeda. Menambah pengetahuan, keterampilan peneliti dalam menganalisis proses pemodelan kimia komputasi pada struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik benzena. Hasil penelitian ini memberikan pengetahuan baru dan pengalaman dalam pelaksanaan pemodelan reaksi substitusi elektrofilik benzena.

E. Definisi Operasional

Untuk meluruskan dan mempertegas arah penelitian, penulis memandang perlu untuk memperjelas beberapa istilah yang berkaitan dengan masalah diatas. Suatu istilah dapat memiliki pengertian yang berbeda-beda sesuai dengan sumber yang diambilnya, dibawah ini beberapa istilah yang digunakan dalam penelitian pemodelan kimia komputasi adalah :

1. Lembar Kerja Berbasis *POE (Predict-Observe-Explain)*

Lembar kerja berbasis *POE* merupakan salah satu sumber belajar yang dapat dikembangkan oleh guru sebagai fasilitator dalam kegiatan pembelajaran yang dapat menyelidiki gagasan dan cara menerapkan pengetahuan pada keadaan yang sebenarnya, untuk menyelidikinya diperlukan soal-soal yang dapat menggali ketiga kemampuan itu yaitu soal-soal yang memprediksi, mengamati dan menjelaskan (Yunita, 2014:11).

2. *NwChem*

NwChem merupakan salah satu jenis software kimia komputasi untuk perhitungan *ab initio* baik dengan metode mekanika kuantum atau dinamika molekuler. Software ini dapat dijalankan pada mesin komputer konvensional atau high-performance dan dapat diinstal secara paralel. Software ini dikembangkan oleh *Environmental Molecular Sciences Laboratory (EMSL)*, salah satu laboratorium di *Pacific Northwest National Laboratory (PNNL)* (Haitamisyah, 2010:29).

3. Reaksi Substitusi Elektrofilik Benzena

Reaksi substitusi elektrofilik merupakan reaksi penggantian suatu gugus dengan gugus lain, dimana terjadi apabila gugus pengganti merupakan pereaksi elektrofil. Elektrofil merupakan spesi yang tertarik pada muatan negatif. Jadi elektrofil merupakan suatu asam Lewis. Pada umumnya reaksi substitusi elektrofilik yang disubstitusi adalah H^+ atau asam Lewis. Reaksi Substitusi Elektrofilik dapat terjadi pada senyawa benzena atau benzena tersubstitusi (Frieda dan Suja, 2004:98).

F. Kerangka Pemikiran

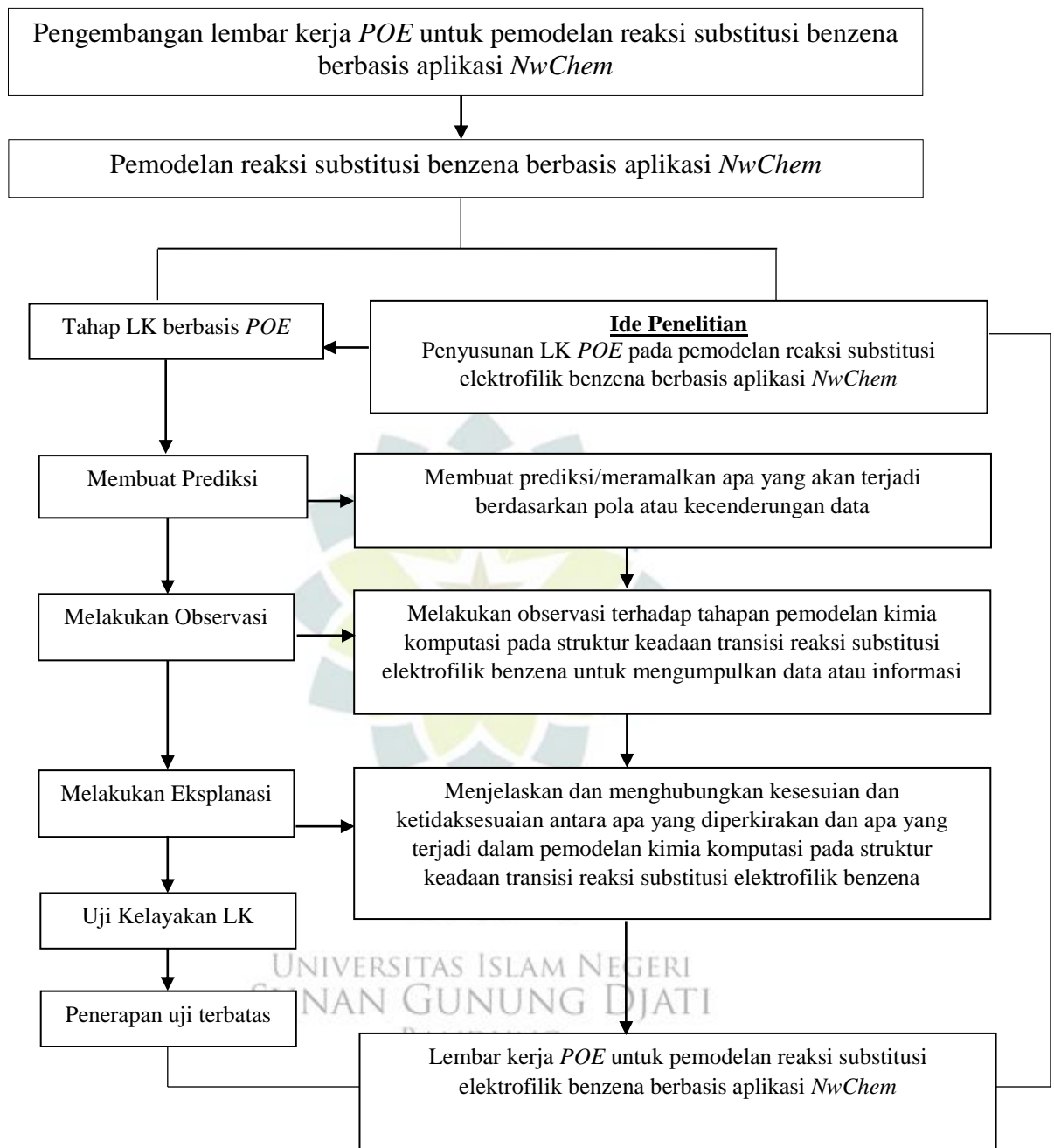
Pemodelan kimia komputasi dapat dijadikan sebagai salah satu alternatif yang dapat digunakan untuk meningkatkan pemahaman mahasiswa pada mata kuliah kimia organik I khususnya pada konsep reaksi substitusi elektrofilik benzena. Program untuk pemodelan kimia komputasi yang akan digunakan adalah *NwChem (Northwest Computational Chemistry Package)* versi 6.5. Suatu pemodelan membutuhkan lembar kerja agar pelaksanaannya lebih efektif. Untuk itu, perlu dikembangkan penyusunan lembar kerja pemodelan kimia komputasi pada struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik benzena menggunakan *NwChem*.

Lembar kerja yang digunakan pada pemodelan kimia komputasi struktur keadaan transisi reaksi substitusi elektrofilik benzena mengacu pada tahapan berbasis *POE* yakni, memprediksi (*Predict*), mengamati (*Observe*), menjelaskan (*Explain*) (Yunita, 2014:50). Lembar kerja yang telah disusun selanjutnya

dilakukan validasi kepada dosen ahli, kemudian dilakukan uji terbatas kepada mahasiswa.

Secara sistematis, kerangka berpikir pengembangan lembar kerja ini dapat disajikan pada Gambar 1.1





Gambar 1.1 Kerangka pemikiran

G. Hasil-hasil Penelitian yang Relevan

Pengembangan lembar kerja berbasis *POE (Predict, Observe, Explain)* ini telah diteliti oleh beberapa ahli dalam pendidikan sains khususnya dibidang kimia. Salah satu penelitian yang telah dilaksanakan yaitu pada konsep kelarutan dan hasil kali kelarutan oleh Puriyandari, *dkk.* (2014). Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa lembar kerja *POE* layak digunakan untuk mendukung pembelajaran dan dapat membantu meningkatkan sikap ilmiah siswa (persentase sikap ilmiah siswa dengan kategori tinggi sebesar 50% pada siklus I dan meningkat menjadi 84,4% pada siklus II) dan dapat meningkatkan prestasi belajar siswa (ketuntasan belajar siswa dari aspek kognitif meningkat dari 31,2% pada siklus I menjadi 71,8% pada siklus II, sedangkan dari aspek afektif menunjukkan bahwa terdapat peningkatan presentase dari 53,1% pada siklus I menjadi 78,1% pada siklus II) (Puriyandari, *et al.*, 2014).

Penelitian lain yang telah dilakukan oleh Syamsuri, Sulisetijono & Rahayu (2007) menunjukkan bahwa LK *POE* layak digunakan untuk mendukung pembelajaran dengan persentase nilai keefektifan sebesar 87,5% dengan kategori sangat baik. Terdapat penelitian lain yang telah dilakukan oleh Putri (2016) mengenai pengembangan Lembar Kerja Siswa berbasis *Predict-Observe-Explain (POE)* pada materi Fluida Statis di Sekolah Menengah Atas kelas XII. Hasil penelitian tersebut menunjukkan bahwa LK berbasis *POE* efektif dan layak digunakan dengan persentase keefektifan sebesar 75% dengan kategori sangat baik.

Penelitian yang sama mengenai pengembangan lembar kerja berbasis *POE* telah dilakukan oleh Fannie & Rohati (2014). Hasil penelitian tersebut menunjukkan LK berbasis *POE* pada materi program linear XII IPA 3 di SMA Negeri 5 Kota Jambi, efektif dan layak digunakan untuk mendukung pembelajaran dengan persentase keefektifan sebesar 82,36% dengan kategori sangat baik.

Selain itu, telah dilakukan penelitian lain mengenai penggunaan *NwChem* oleh beberapa ahli dalam pendidikan sains khususnya dibidang kimia. Penelitian yang telah dilakukan yaitu penggunaan *NwChem* pada proses pembentukan senyawa kompleks antara logam platina dengan ligan NH_3 , Cl^- , Pyr, en, dan dien (Nugraha & Martoprawiro, 2012). Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa metode perhitungan komputasi yang paling optimal dalam penentuan energi unsur Ag, senyawa dari ligan-ligan NH_3 , Cl^- , Pyr, en, dan dien dan senyawa kompleks yang terbentuk adalah menggunakan basis set perhitungan "wtbs" *NwChem* (Nugraha & Martoprawiro, 2012).

Selain itu, telah dilakukan penelitian lain mengenai pemodelan molekul pada aktivitas senyawa turunan mangiferin sebagai anti diabetes tipe 1 menggunakan metode HKSA dan penambatan molekul pada protein CD4. Pemodelan molekul dilakukan dengan cara optimasi geometri melalui metode Hartree-Fock (HF) dalam software Avogadro pada basis 6-31G untuk menstabilisasi struktur dengan tingkatan energi yang paling minim. Untuk perhitungan deskriptor elektronik, sterik, dan hidrofobik menggunakan software *NwChem*. Perhitungan statistik berdasarkan metode regresi linier berganda dengan

menggunakan program SPSS 20.0 for Windows. Analisis statistik dilakukan berdasarkan persyaratan statistik dan kelengkapan prediktor Hansch dari beberapa model persamaan sehingga didapatkan model persamaan terbaik. Penambatan molekul senyawa mangiferin dan turunannya dengan protein CD4 menggunakan software Autodock Tool 4.2, ChemBio 3D, dan Pymol 4.0. Hasil penelitian dari pemodelan berdasarkan HKSA menunjukkan bahwa model persamaan terbaik adalah menggunakan *NwChem* dengan hasil sebagai berikut: $\text{LogP} = -33.320 - (19.8699) \cdot \text{EHOMO} + (0.6745) \cdot \text{dipol} - (12.8913) \cdot \text{surfaces} + (22.1723) \cdot \text{volume} - (0.2885) \cdot \text{ELUMO} - (0.0003) \cdot \text{Ehidrasi}$ ($n = 10$; $m = 6$; $R = 0,993$; $R^2 = 0,987$; $\text{Adj } R^2 = 0,961$; $\text{SEE} = 0,21989$; rasio Fhitung/Ftabel = 8,94) (Sealy, Dewi, & Sanjaya, 2018).

