

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Ilmu kimia di bangun oleh tiga level representasi, yaitu level makroskopik, mikroskopik dan simbolik. Untuk mengembangkan pemahaman peserta didik terhadap kimia, pembelajaran harus membimbing mereka menggunakan berbagai representasi dan mempertautkan ketiga level representasi yaitu, level makroskopik, level submikroskopik dan level simbolik (Wu, 2003). Adanya tiga level representasi tersebut menunjukkan bahwa untuk mempelajari dan memahami ilmu kimia, peserta didik dituntut untuk menguasai level makroskopik, mikroskopik dan simbolik. peserta didik juga dituntut harus mampu menghubungkan antara ketiga level representasi tersebut, sehingga mereka akan memperoleh konsep kimia secara utuh (Farida dkk., 2016).

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 peserta didik cenderung kesulitan untuk memahami konsep-konsep kimia yang kebanyakan bersifat abstrak (Sheppard, 2006). Menurut (Hinton, M.E., & Nakhleh, 1999) 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.

Kemajuan teknologi yang pesat membuat ilmu kimia lebih mudah untuk dipahami khususnya dari segi submikroskopik (Irwansyah dkk., 2017). Pemanfaatan teknologi seperti kimia komputasi dapat menjadi solusi bagi permasalahan tersebut (Prianto, 2007). Saat ini kimiawan dapat menggunakan komputer untuk mengkaji struktur mikroskopik dan menganalisis sifat-sifat kimia zat lainnya (Chang, 2005). Metode kimia komputasi bersifat sangat fleksibel dan hampir semua materi praktek kimia baik level sederhana maupun dengan tingkat kesulitan tinggi dapat dimodelkan dengan baik menggunakan kimia komputasi menggunakan beberapa *software* diantaranya *NwChem*, *Hyperchem*, dan *Chemsketch* (Fortenberry, R. C., 2015). 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, W, 2014).

Ilmu kimia terdiri dari beberapa cabang, diantaranya kimia organik, didalam kimia organik terdapat materi yang sulit dipahami oleh mahasiswa secara optimal, salah satu materinya adalah reaksi S_N2 . Reaksi S_N2 adalah reaksi substitusi yang melibatkan dua spesi sekaligus dalam satu tahap. Salah satu contoh dari reaksi S_N2 adalah reaksi antara alkil halida primer dengan suatu nukleofil, misalnya ion hidroksida (Solomon, 2011). Berdasarkan survei terhadap beberapa mahasiswa pendidikan kimia

UIN Sunan Gunung Djati Bandung yang sudah mengambil mata kuliah Kimia Organik 1 menyatakan bahwa materi reaksi S_N2 menarik dan menyenangkan untuk dipelajari namun mahasiswa masih kesulitan dalam menentukan keadaan transisi dan laju reaksi dari reaksi S_N2 . Hal ini diperkuat dengan pernyataan dari dosen mata kuliah Kimia Organik yang menyatakan bahwa mahasiswa masih banyak mengalami kesulitan dalam menentukan keadaan transisi dan laju reaksi dari reaksi S_N2 dikarenakan kurangnya keinginan mahasiswa untuk banyak mencoba beberapa soal latihan. Berdasarkan penelitian (Hadisaputra dkk., 2017) keadaan transisi dan laju reaksi dalam proses reaksi kimia organik dapat dilakukan dengan menggunakan pemodelan kimia komputasi menggunakan *NwChem* (*Northwest Computational Chemistry Package*). Selain mudah dipasang, *NwChem* memiliki kelebihan lainnya yaitu memiliki fitur lengkap (Hadisaputra dkk., 2017). Selain itu, *NwChem* dapat meramalkan struktur, kereaktifan, dan mekanisme reaksi serta dapat menentukan keadaan transisi dan energi pengaktifan/hambatan reaksi organik (Ambarwati dkk., 2016).

Pembelajaran melalui pemodelan komputasi tidak akan berjalan lancar tanpa adanya suatu lembar kerja (LK). Lembaran Kerja (LK) merupakan panduan bagi peserta didik untuk mengerjakan pekerjaan tertentu yang dapat meningkatkan dan memperkuat hasil belajar (Sumiati, 2009). Penyusunan lembar kerja harus didasarkan pada suatu model pembelajaran yang dapat meningkatkan keterampilan berpikir kritis. Keterampilan berpikir kritis dapat dikembangkan dengan dilakukan strategi – strategi, metode dan pendekatan untuk mencapai tujuan yang diinginkan dengan dibuat lebih bervariasi dengan menerapkan model pembelajaran yang sesuai sehingga pemahaman

mahasiswa terhadap materi akan semakin maksimal. Menurut (Fisher, 2008), berpikir kritis adalah metode berpikir mengenai hal, substansi atau masalah apa saja dimana si pemikir meningkatkan kualitas pemikirannya dengan menangani secara terampil struktur-struktur yang melekat dalam pemikiran dan menerapkan standar-standar intelektual padanya.

Dalam pembelajaran kimia perlu dikembangkan keterampilan berpikir kritis, maka seharusnya dibuat lebih bervariasi dengan menerapkan pembelajaran yang sesuai sehingga pemahaman mahasiswa terhadap materi akan semakin maksimal. Dengan hal ini akan dikembangkan keterampilan berpikir kritis dengan menggunakan bahan ajar yang berupa Lembar Kerja Mahasiswa berbasis *Predict-Observe-Explain (POE)*. Lembar Kerja Mahasiswa *POE* ini bertujuan agar mahasiswa menjadi lebih aktif, kreatif, dan mandiri serta melatih dalam berpikir kritis.

Lembar Kerja Berbasis *POE* merupakan strategi pembelajaran untuk menyelidiki pemahaman mahasiswa dengan menggunakan 3 soal. Pertama, mahasiswa harus memprediksikan hasil suatu kejadian dan harus yakin akan prediksinya, kemudian mereka harus menggambarkan apa yang mereka lihat dan terakhir mereka harus merekonsiliasi antara prediksi dan hasil observasi (M. Kearney, 2004). Model pembelajaran *POE* telah digunakan untuk memunculkan pemahaman siswa (M. Kearney, 2004), menentukan konsepsi alternatif siswa (Champagne & Klopfer, 2007), dan mempromosikan pemahaman konseptual (Tao & Gunstone, 2010). Selain itu, lembar kerja *POE* juga dapat digunakan untuk meningkatkan keterampilan berpikir siswa.

Sehubungan dengan hal tersebut, keadaan transisi dan laju reaksi untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem* yang akan dikembangkan untuk lembar kerja berbasis *Predict-Observe-Explain (POE)*. Berdasarkan uraian latar belakang masalah, maka penulis merasa perlu diadakan penelitian proposal yang berjudul **“PENGEMBANGAN LEMBAR KERJA BERBASIS *PREDICT-OBSERVE-EXPLAIN* UNTUK PEMODELAN REAKSI S_N2 PADA ALKIL HALIDA MENGGUNAKAN *NwChem*”**.

B. Rumusan Masalah Penelitian

Berdasarkan latar belakang yang telah dikemukakan di atas, dapat dirumuskan masalah sebagai berikut :

- 1) Bagaimana tampilan lembar kerja untuk setiap tahap pada pengembangan lembar kerja mahasiswa berbasis *predict-observe-explain* untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*?
- 2) Bagaimana hasil uji kelayakan lembar kerja mahasiswa berbasis *predict-observe-explain* untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*?
- 3) Bagaimana hasil analisis perhitungan untuk menentukan harga ΔH reaksi dan Energi Aktivasi S_N2 pada alkil halida berdasarkan data hasil perhitungan *NwChem*?

C. Tujuan Penelitian

Berdasarkan latar belakang yang telah dikemukakan di atas, tujuan dari penelitian ini adalah :

- 1) Menampilkan hasil tahapan pengembangan lembar kerja mahasiswa berbasis *predict-observe-explain* untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*.
- 2) Menentukan hasil uji kelayakan lembar kerja mahasiswa berbasis *predict-observe-explain* untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem* pada mahasiswa pendidikan kimia UIN Sunan Gunung Djati Bandung.
- 3) Menganalisis hasil perhitungan *NwChem* untuk menentukan nilai ΔH reaksi dan Energi Aktivasi S_N2 pada alkil halida.

D. Manfaat Hasil Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan memberikan manfaat untuk berbagai pihak sebagai berikut:

- 1) Lembar Kerja berbasis *Predict-Observe-Explain (POE)* dapat diterapkan kepada mahasiswa dengan mengaplikasikan pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida dengan menggunakan *NwChem*, sehingga mahasiswa dapat lebih aktif, kreatif dan mandiri dalam pembelajaran.
- 2) Memberikan informasi baru dan alternatif percobaan dengan lebih mengefisiensikan waktu, tenaga dan biaya serta bahaya praktikum dan limbah dengan pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida dengan menggunakan *NwChem* untuk meningkatkan mutu pembelajaran dalam proses belajar mengajar dengan model pendekatan *Predict-Observe-Explain (POE)*.

- 3) Memberikan pengetahuan baru dan pengalaman dalam pelaksanaan praktikum yang lebih mengefisienkan waktu, tenaga, dan biaya serta bahaya praktikum dan limbah dengan pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*. Dan dapat dijadikan informasi pengetahuan pada penelitian selanjutnya.

E. Definisi Operasional

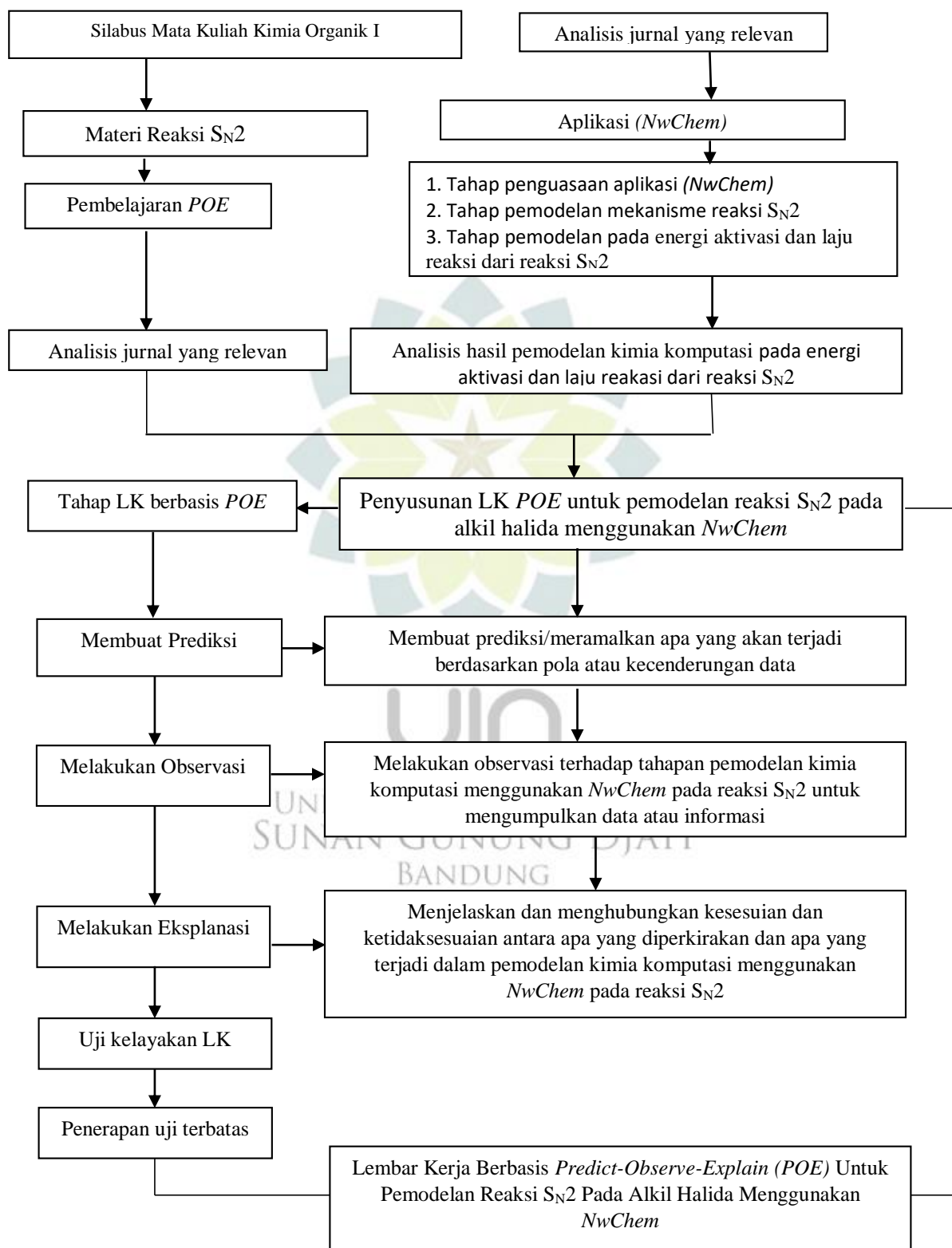
- 1) Lembar Kerja Berbasis *POE* merupakan strategi pembelajaran untuk menyelidiki pemahaman mahasiswa dengan menggunakan 3 soal. Pertama, mahasiswa harus memprediksikan hasil suatu kejadian dan harus yakin akan prediksinya, kemudian mereka harus menggambarkan apa yang mereka lihat dan terakhir mereka harus merekonsiliasi antara prediksi dan hasil observasi (M. Kearney, 2000).
- 2) Kimia komputasi merupakan cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (atau banyak molekul protein gas, cairan, padatan, dan kristal cair), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata (Prianto, 2007).
- 3) *NwChem* adalah salah satu *software* pemodelan komputasi yang didasarkan pada metode struktur elektronik (*HF*, *DFT*, *MP2*, *CCSDT*, *CASSCF*), simulasi *QM/MM* (*Quantum Mechanic/Molecular Mechanic*), simulasi MD (*Molecular Dynamics*) (Prianto, 2007). perhitungan menggunakan *plane wave basis set* (Ambarwati dkk., 2016).

- 4) Reaksi S_N2 adalah reaksi substitusi yang melibatkan dua spesi/pereaksi sekaligus dalam satu tahap mekanisme reaksi (Solomon, 2011).

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 S_N2 . Program untuk pemodelan kimia komputasi yang akan digunakan adalah *NwChem* (*Northwest Computational Chemistry Package*). Suatu pemodelan membutuhkan lembar kerja agar pelaksanaannya lebih efektif. Untuk itu, perlu dikembangkan penyusunan lembar kerja pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*.

Lembar kerja yang digunakan pada pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida mengacu pada tahapan berbasis *POE* yakni, memprediksi (*Predict*), mengamati (*Observe*), menjelaskan (*Explain*) (Yunita, 2014). 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 Berpikir

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 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 (Putri, 2016).

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. Penelitian lain yang telah dilakukan oleh Syamsuri dkk., (2007) menunjukkan bahwa LK *POE* layak digunakan untuk mendukung pembelajaran dengan persentase nilai keefektifan sebesar 87,5% dengan kategori sangat baik.

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* (Sealy, Dewi, & Sanjaya, 2018).

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 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*, *dien* dan senyawa kompleks yang terbentuk adalah menggunakan basis set perhitungan "wtbs" *NwChem* (Nugraha & Martoprawiro, 2012).