

## **STUDI MEKANISME KONVERSI 1-BUTANOL MENJADI 1,1-DIBUTOKSIBUTANA DENGAN KATALIS ZnO MENGGUNAKAN METODE DFT-B3LYP DAN MP2**

Bayu Megananda

13/347298/PA/15187

### **INTISARI**

Jalur mekanisme konversi 1,1-dibutoksibutana dari 1-butanol dengan katalis ZnO telah diteliti secara kimia komputasi sebagai prediksi untuk penentuan jalur mekanisme konversi dan penentuan energi aktivasi. Prediksi jalur mekanisme konversi dan energi aktivasi dilakukan melalui pendekatan *intrinsic reaction coordinate* (IRC) menggunakan metode DFT-B3LYP dan MP2.

Hasil yang diperoleh dalam penelitian ini menunjukkan bahwa, jalur yang dituju dalam mekanisme konversi cenderung untuk terlebih dahulu membentuk aldehid daripada eter. Energi aktivasi yang didapatkan sebesar 21,0001 kJ/mol dari perhitungan menggunakan metode DFT-B3LYP 6-31+G dan sebesar 52,4511 kJ/mol dari perhitungan menggunakan metode MP2=Full/6-31+G.

Kata Kunci : 1-Butanol, 1,1-Dibutoksibutana, DFT, IRC, MP2.

***STUDY OF THE CONVERSION MECHANISM OF 1-BUTANOL  
INTO 1,1-DIBUTOXYBUTANE WITH ZnO CATALYST USING  
DFT-B3LYP AND MP2 METHODS***

Bayu Megananda

13/347298/PA/15187

***ABSTRACT***

The 1,1-dibutoxybutane conversion mechanism pathway from 1-butanol to ZnO catalyst has been investigated using computational chemistry as predictions for the determination of the pathway of the conversion mechanism and the determination of activation energy. Prediction of conversion mechanism pathway and activation energy were done through intrinsic reaction coordinate (IRC) approach using the DFT-B3LYP and MP2 methods.

The results obtained in this study indicate that, the pathway in the conversion mechanism tends to form the aldehyde rather than the ether. The activation energy obtained was 21.0001 kJ/mol in the calculation using DFT-B3LYP 6-31+G method and 52.4511 kJ/mol in the calculation using MP2 = Full/6-31+G method.

Keywords : 1-butanol,1,1-dibutoxybutane, DFT, IRC, MP2