

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PENGESAHAN .....	ii
LEMBAR PERNYATAAN .....	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	iv
PRAKATA.....	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
DAFTAR SINGKATAN .....	xii
INTISARI.....	xiii
ABSTRACT.....	xiv
BAB I. PENDAHULUAN .....	1
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Tujuan Penelitian .....	5
I.3 Manfaat Penelitian .....	5
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS .....	6
II.1 1-Butanol .....	6
II.2 1,1-Dibutoksibutana .....	6
II.3 Katalis dan Logam Zn .....	8
II.3.1 Katalis.....	8
II.3.2 Logam Zn .....	8
II.4 Energi Aktivasi dan Jalur Mekanisme Konversi 1-Butanol menjadi 1,1-Dibutoksibutana .....	9
II.4.1 Energi aktivasi.....	9
II.4.2 Jalur mekanisme konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana .....	10
II.5 Karakterisasi dengan GC dan GC-MS Hasil Eksperimen .....	11
II.6 Metode Kimia Komputasi .....	12
II.7 Metode DFT dan Metode Møller-Plesset Perturbation Theory .....	13
II.7.1 Metode DFT .....	13
II.7.2 Metode Møller-Plesset Perturbation Theory .....	14
II.8 Fungsi Hybrid B3LYP .....	15
II.9 Himpunan Basis .....	16
II.10 <i>Intrinsic Reaction Coordinate</i> (IRC).....	18
II.11 Keadaan Transisi .....	19
II.12 Perumusan Hipotesis dan rancangan Penelitian .....	20
II.12.1 Perumusan hipotesis.....	20
II.12.2 Rancangan penelitian .....	21
BAB III. METODE PENELITIAN .....	23
III.1 Alat Penelitian.....	23
III.2 Bahan Kajian.....	23
III.3 Prosedur Penelitian.....	23
III.3.1 Uji validasi metode kimia komputasi .....	23

III.3.2	Prediksi proses mekanisme konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana .....	24
III.3.3	Menentukan energi aktivasi sebagai penentu jalur mekanisme konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana .....	24
<b>BAB IV.</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>25</b>
IV.1	Validasi Metode Kimia Komputasi .....	25
IV.2	Prediksi Proses Mekanisme Konversi .....	26
IV.2.1	Prediksi mekanisme konversi jalur eter 1 .....	27
A.	Mekanisme pembentukan senyawa 1.1 .....	29
B.	Mekanisme pembentukan senyawa 1.2 .....	30
C.	Mekanisme pembentukan senyawa 1.3 .....	33
D.	Mekanisme pembentukan senyawa 1.4 .....	35
E.	Mekanisme pembentukan 1,1-dibutoksibutana melalui senyawa 1.4.....	38
IV.2.2	Prediksi mekanisme konversi jalur eter 2 .....	40
A.	Mekanisme pembentukan senyawa 2.1 .....	42
B.	Mekanisme pembentukan senyawa 2.2 .....	44
C.	Mekanisme pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 2.2.....	45
IV.2.3	Prediksi mekanisme konversi jalur aldehid .....	48
A.	Mekanisme pembentukan senyawa 3.1 .....	50
B.	Mekanisme pembentukan senyawa 3.2 .....	52
C.	Mekanisme pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 3.2.....	53
IV.3	Penentuan Jalur Mekanisme Reaksi .....	55
IV.3.1	Kurva energi jalur eter 1 .....	56
IV.3.2	Kurva energi jalur eter 2 .....	57
IV.3.3	Kurva energi jalur aldehid .....	58
<b>BAB V.</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN.....</b>	<b>60</b>
V.1	Kesimpulan .....	60
V.2	Saran .....	60
	<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>61</b>
	<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>64</b>

## DAFTAR GAMBAR

Gambar I.1	Struktur senyawa 1,1-dibutoksibutana.....	2
Gambar II.1	Gambar struktur senyawa butanol.....	6
Gambar II.2	Gambar struktur senyawa 1,1-dibutoksibutana.....	7
Gambar II.3	Peta <i>potential energy surface</i> terhadap hubungan reaktan, bentuk transisi, intermediet, dan produk.....	9
Gambar II.4	Proses mekanisme konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana yang terjadi menurut Putra (2015) dan Selawati (2016).....	10
Gambar II.5	Mekanisme reaksi konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana versi whitaker dalam patennya tahun 1958.....	11
Gambar II.6	Perbedaan bentuk fungsi basis STO dan GTO.....	18
Gambar II.7	Gabungan himpunan basis GTO agar menyerupai himpunan basis STO.....	18
Gambar IV.1	Struktur 1-butanol hasil optimasi MP4=FULL/6-311G** yang menjadi pembanding dalam validasi metode.....	26
Gambar IV.2	Prediksi jalur eter 1 dalam konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana.....	28
Gambar IV.3	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 1.1 dari butanol dan ZnO.....	29
Gambar IV.4	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) 1-butanol dan ZnO, (b) bentuk transisi 1.1, (c) serta senyawa 1.1....	29
Gambar IV.5	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 1.2 dari senyawa 1.1 dan 1-butanol.....	30
Gambar IV.6	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) senyawa 1.1 dengan 1-butanol, (b) bentuk transisi 1.2, dan (c) senyawa 1.2 yang melepaskan H <sub>2</sub> O.....	31
Gambar IV.7	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 1.3 dari senyawa 1.2.....	33
Gambar IV.8	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) senyawa 1.2, (b) bentuk transisi 1.3, dan (c) senyawa 1.3 yang melepas HOZnO.....	33
Gambar IV.9	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 1.4 dari senyawa 1.3 dengan 1-butanol.....	35
Gambar IV.10	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) senyawa 1.3 dengan 1-butanol, (b) bentuk transisi 1.4, dan (c) senyawa 1.4.....	36
Gambar IV.11	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 1.4 dengan 1-butanol...	38
Gambar IV.12	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC senyawa 1.4 dengan 1-butanol (a), bentuk transisi 1.5 (b), dan 1,1-dibutoksibutana (c).....	38

Gambar IV.13	Jalur Eter 2 yang digunakan sebagai prediksi konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana.....	41
Gambar IV.14	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 2.1 dari 2 molekul 1-butanol.....	42
Gambar IV.15	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) reaktan, (b) bentuk transisi 2.1, dan (c) senyawa 2.1 yang melepas H <sub>2</sub> O.....	42
Gambar IV.16	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 2.2 dari senyawa 2.1 dengan ZnO.....	44
Gambar IV.17	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) senyawa 2.1 dengan ZnO, bentuk transisi 2.2,(b) dan (c) senyawa 2.2 yang melepas HOZnH.....	44
Gambar IV.18	Struktur 2 dimensi pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 2.2 dan 1-butanol.....	45
Gambar IV.19	Struktur hasil perhitungan IRC (a) senyawa 2.2 dengan 1-butanol, (b) bentuk transisi 2.3, dan (c) 1,1-dibutoksibutana.....	46
Gambar IV.20	Jalur aldehid yang digunakan sebagai prediksi konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana.....	49
Gambar IV.21	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 3.1 dari produk 1-butanol dan ZnO.....	50
Gambar IV.22	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) 1-butanol dengan ZnO, bentuk transisi 3.1, (b) dan (c) senyawa 3.1 yang melepas HOZnH.....	50
Gambar IV.23	Struktur 2 dimensi pembentukan senyawa 3.2 dari senyawa 3.1 (butanal) dengan 1-butanol.....	52
Gambar IV.24	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) senyawa 3.1 dengan 1-butanol, (b) bentuk transisi 3.2, (c) dan senyawa 3.2.....	52
Gambar IV.25	Struktur 2 dimensi pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 3.2 dengan 1-butanol.....	53
Gambar IV.26	Struktur 3 dimensi hasil perhitungan IRC (a) senyawa 3.2 dengan 1-butanol, (b) bentuk transisi 3.3, (c) dan 1,1-dibutoksibutana yang melepas H <sub>2</sub> O.....	54
Gambar IV.27	Kurva energi jalur eter 1 menggunakan metode (a) DFT-B3LYP 6-31+G dan (b) MP2=Full/6-31+G**.....	56
Gambar IV.28	Kurva energi jalur eter 2 menggunakan metode (a) DFT-B3LYP 6-31+G dan (b) MP2=Full/6-31+G**.....	57
Gambar IV.29	Kurva energi jalur aldehid menggunakan metode (a) DFT-B3LYP 6-31+G dan (b) MP2=Full/6-31+G**.....	58

## DAFTAR TABEL

Tabel I.1	Tabel hasil sintesis konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana dengan menggunakan berbagai katalis logam transisi.....	3
Tabel IV.1	Validasi penentuan himpunan basis dengan membandingkan hasil optimasi panjang ikatan antar atom berbagai himpunan basis dalam 1-butanol pada tingkat teori DFT-B3LYP dan MP2 dengan MP4=FULL/6-311G**, data dibandingkan berdasarkan linieritasnya.....	25
Tabel IV.2	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1.1 (Å)...	30
Tabel IV.3	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1.2 (Å)...	31
Tabel IV.4	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1.3 (Å)...	34
Tabel IV.5	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1.4 (Å)...	37
Tabel IV.6	Parameter mekanisme reaksi pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 1.4 (Å).....	39
Tabel IV.7	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 2.1 (Å)...	43
Tabel IV.8	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 2.2 (Å)...	45
Tabel IV.9	Parameter mekanisme reaksi pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 2.2 (Å).....	47
Tabel IV.10	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 3.1 (Å)...	51
Tabel IV.11	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 3.2 (Å)...	53
Tabel IV.12	Parameter mekanisme reaksi pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari senyawa 3.2 (Å).....	55
Tabel IV.13	Tabel energi aktivasi mekanisme konversi 1-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana dari setiap jalur yang dilalui menggunakan metode DFT-B3LYP 6-31+G dan MP2=Full/6-31+G** .....	59