

PENENTUAN MEKANISME PEMBENTUKAN 1,1-DIBUTOKSIBUTANA DARI n-BUTANOL TERKATALIS FeO DENGAN MENGGUNAKAN METODE DFT/B3LYP

Juniman Ifanali Loi
12/331895/PA/14800

INTISARI

Penentuan mekanisme pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari n-butanol terkatalis FeO dengan menggunakan metode DFT/B3LYP telah dilakukan dengan perhitungan kimia komputasi. Metode DFT digunakan untuk mencari struktur keadaan transisi dan menghitung energi setiap struktur yang terlibat dalam mekanisme reaksi. Pendekatan *Intrinsic Reaction Coordinate* (IRC) digunakan untuk menghubungkan antara reaktan dan produk melalui keadaan transisi. Energi aktivasi (E_a) dihitung dari selisih energi keadaan transisi dan energi reaktan.

Hasil penelitian menunjukkan energi aktivasi jalur eter 48,125 kJ/mol, energi aktivasi jalur aldehid 1 111,846 kJ/mol dan energi aktivasi jalur aldehid 2 111,846 kJ/mol. Jalur eter pada temperatur normal ditentukan sebagai mekanisme yang membentuk 1,1-dibutoksibutana dari n-butanol terkatalis FeO karena memiliki energi aktivasi yang paling kecil.

Kata Kunci : n-Butanol, 1,1-Dibutoksibutana, DFT, Keadaan Transisi, IRC.

**DETERMINATION OF MECHANISM THE FORMATION OF 1,1-DIBUTOXYBUTANE
FROM n-BUTANOL CATALYZED BY FeO USING DFT/B3LYP METHOD**

Juniman Ifanali Loi
12/331895/PA/14800

ABSTRACT

Determination of mechanism the formation of 1,1-dibutoxybutane from n-butanol catalyzed by FeO using DFT/B3LYP method has been performed with computational chemistry calculations. The DFT method is used to find the transition state structure and calculate the energy of each structure involved in the reaction mechanism. The *Intrinsic Reaction Coordinate* (IRC) approach is used to connect between reactants and products through a transition state. The activation energy (E_a) is calculated from the energy difference of the transition state and the energy of the reactant.

The results showed the activation energy of the ether path of 48,125 kJ/mol, the activation energy of the aldehyde path 1 111,846 kJ/mol and activation energy of aldehyde path 2 111,846 kJ/mol. The ether pathway at normal temperature is defined as a mechanism which forms 1,1-dibutoxybutane from n-butanol catalyzed by FeO because it has the smallest activation energy.

Keywords : n-Butanol, 1,1-Dibutoxybutane, DFT, Transition State, IRC.