

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
I.3 Manfaat Penelitian.....	5
TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS.....	6
II.1 Tinjauan Pustaka.....	6
II.1.1 1,1-dibutoksibutana	6
II.1.2 n-butanol	7
II.1.3 Katalis.....	7
II.1.3.1 Logam Fe.....	8
II.1.4 Keadaan transisi (transition state)	8
II.1.5 Metode kimia komputasi	10
II.1.5.1 Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	10
II.1.5.2 Fungsi hybrid B3LYP	11
II.1.6 <i>Intrinsic reaction coordinate</i> (IRC)	12
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	13
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	13
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	14
II.2.3 Rancangan penelitian.....	14
METODE PENELITIAN	16
III.1 Alat Penelitian	16
III.2 Bahan Kajian	16

III.3	Prosedur Penelitian	16
III.3.1	Uji validasi metode pada basis set	16
III.3.2	Usulan perkiraan jalur mekanisme reaksi pembentukan 1,1-dibutoksibutana dari n-butanol dan FeO sebagai katalis..	17
III.3.3	Menggambarkan struktur senyawa, optimasi, QST3 dan IRC menggunakan gaussview 5.0 dan gaussian 09w.....	17
III.3.4	Menentukan energi aktivasi dari diagram permukaan energi potensial reaksi beberapa tahap dari pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibutana.....	18
HASIL DAN PEMBAHASAN		19
IV.1.	Validasi Basis Set.....	19
IV.2	Prediksi Jalur Mekanisme Berdasarkan Data GC-MS dan Hasil Perhitungan Optimasi Struktur Keadaan Transisi Menggunakan DFT B3LYP (6-31d).....	20
IV.2.1	Mekanisme jalur eter	20
IV.2.2	Mekanisme jalur aldehid 1.....	24
IV.2.3	Mekanisme jalur aldehid 2.....	36
IV.3	Diagram Energi Pada Mekanisme Pembentukan Senyawa 1,1-Dibutoksibutana Dari n-Butanol Dengan Katalis FeO.....	38
KESIMPULAN DAN SARAN		46
V.1	Kesimpulan	46
V.2	Saran	46
DAFTAR PUSTAKA		47
LAMPIRAN		50

DAFTAR GAMBAR

Gambar I.1	Struktur senyawa 1,1-dibutoksibutana	2
Gambar II.1	Struktur optimasi senyawa 1,1-dibutoksibutana	6
Gambar II.2	Struktur senyawa n-butanol	7
Gambar II.3	Skema ilustrasi jalur reaksi	9
Gambar II.4	Titik pada permukaan energi potensial (PES)	13
Gambar IV.1	Struktur hasil optimasi senyawa kompleks n-butanol dengan katalis logam FeO	23
Gambar IV.2	Prediksi mekanisme reaksi jalur eter dalam pembentukan senyawa target 1,1-dibutoksibutana dari n-butanol dengan katalis FeO	25
Gambar IV.3	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa kompleks eter jalur eter (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	26
Gambar IV.4	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan intermediet senyawa kompleks eter jalur eter (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	27
Gambar IV.5	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa target 1,1-dibutoksibutana jalur eter (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	28
Gambar IV.6	Prediksi mekanisme reaksi jalur aldehid 1 dalam pembentukan senyawa target 1,1-dibutoksibutana dari n-butanol dengan katalis FeO	32
Gambar IV.7	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa n-butanol jalur aldehid 1 (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	33
Gambar IV.8	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa 1-butoksibutana-1-ol jalur aldehid 1 (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	34
Gambar IV.9	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa target 1,1-dibutoksibutana jalur aldehid 1 (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	35
Gambar IV.10	Prediksi mekanisme reaksi jalur aldehid 2 dalam pembentukan senyawa target 1,1-dibutoksibutana dari n-butanol dengan katalis FeO	39

Gambar IV.11	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa butil butirat jalur aldehyd 2 (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	40
Gambar IV.12	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibuta-1-ena jalur aldehyd 2 (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	41
Gambar IV.13	Struktur optimasi hasil perhitungan pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibutana jalur aldehyd 2 (a) struktur keadaan awal (b) struktur keadaan transisi (c) struktur keadaan akhir	42
Gambar IV.14	Diagram permukaan energi potensial jalur eter	44
Gambar IV.15	Diagram permukaan energi potensial jalur aldehyd 1	44
Gambar IV.16	Diagram permukaan energi potensial jalur aldehyd 2	45

DAFTAR TABEL

Tabel I.1	Hasil sintesis konversi n-butanol menjadi 1,1-dibutoksibutana dengan berbagai katalis logam transisi	2
Tabel II.1	Panjang ikatan antar atom pada n-butanol hasil XRD	7
Tabel IV.1	Validasi penentuan basis set dengan membandingkan panjang ikatan antar atom yang terdapat pada senyawa n-butanol hasil XRD dengan hasil optimasi dari beberapa basis set berdasarkan linieritasnya pada tingkat perhitungan DFT(B3LYP)	19
Tabel IV.2	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa kompleks eter dan H ₂ O berdasarkan jarak antar atom	21
Tabel IV.3	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa intermediet kompleks eter berdasarkan jarak antar atom	23
Tabel IV.4	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibutana jalur eter berdasarkan jarak antar atom	24
Tabel IV.5	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa n-butanol berdasarkan jarak antar atom	29
Tabel IV.6	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1-butoksibutana-1-ol berdasarkan jarak antar atom	30
Tabel IV.7	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibutana jalur aldehid 1 berdasarkan jarak antar atom	31
Tabel IV.8	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa butil butirat berdasarkan jarak antar atom	36
Tabel IV.9	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibut-1-ena berdasarkan jarak antar atom	37
Tabel IV.10	Parameter mekanisme reaksi pembentukan senyawa 1,1-dibutoksibutana jalur aldehid 2 berdasarkan jarak antar atom	38

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Input file optimasi geometri reaktan	51
Lampiran 2	Input file optimasi geometri produk	53
Lampiran 3	Input file mencari geometri bentuk transisi dari reaktan menjadi produk	55
Lampiran 4	Input file perhitungan IRC	60