

DAFTAR ISI

	hal
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xvi
DAFTAR LAMPIRAN	xix
INTISARI	xxi
ABSTRACT	xxiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.	1
1.2 Tujuan Penelitian	8
1.3 Manfaat	9
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	11
2.1 Komposisi Kimia Minyak Sereh	11
2.2 Sitronelal dan Reaktivitasnya	11
2.3 Reaksi Siklisasi Sitronelal	14
2.4 Kajian Kinetik dan Termodinamik	16
2.4.1 Temperatur reaksi	17
2.4.2 Konsentrasi reaktan dan durasi reaksi	21
2.5 Katalis Reaksi Siklisasi Sitronelal	24
2.6 Kekuatan Asam Lewis dalam Pelarut Nir Air (Non Aqueous Solvent)	30
2.7 Reaksi Bersaing Siklisasi dan Pembentukan Asetal pada Perlindungan Gugus Aldehida pada Sitronelal	31
2.8 Kendali Kinetik terhadap Termodinamik	33
2.9 Kajian Mekanisme dan Stereoselektivitas dengan Metode DFT	33



BAB III	LANDASAN TEORI	41
3.1	Landasan Teori	41
3.2	Hipotesis	50
BAB IV	METODE PENELITIAN	52
4.1	Bahan	52
4.2	Peralatan	52
4.2.1	Alat-alat gelas, pemanas dan mekanik	52
4.2.2	Alat-alat uji sifat fisik	52
4.2.3	Alat-alat untuk analisis dan elusidasi struktur	53
4.2.4	Alat-alat untuk karakterisasi katalis	53
4.2.5	Alat dan software kimia komputasi	53
4.3	Variabel Penelitian	53
4.4	Prosedur Penelitian	54
4.4.1	Isolasi sitronelal dari minyak sereh dan uji sifat fisiknya	54
4.4.2	Analisis rasio enantiomer sitronelal	54
4.4.3	Preparasi Katalis Zeolit Alam Termodifikasi	54
4.4.3.1	Aktiasi zeolit alam dengan perlakuan asam	54
4.4.3.2.	Preparasi H-Za dengan pertukaran ion.	55
4.4.3.3	Preparasi katalis Fe^{3+} -Za dan Zn^{2+} -Za dari H-Za dengan pertukaran ion	55
4.4.4	Karakterisasi katalis	55
4.4.4.1	Penentuan kandungan logam/kation dan dalam sampel katalis	56
4.4.4.2	Penentuan keasaman katalis	56
4.4.4.3	Penentuan luas permukaan dan rerata jari pori	57
4.4.4.4	Analisis XRD	57
4.4.4.5	Penentuan rasio Si/Al dan kandungan logam	57
4.4.4.6	Analisis SEM dan TEM	57
4.4.5	Uji awal aktivitas katalis termodifikasi	58
4.4.6	Reaksi siklisasi-asetilasi sitronelal	58
4.4.7	Isolasi dan idetifikasi produk reaksi	59
4.4.8	Kajian kinetika reaksi siklisasi-asetilasi sitronelal	60
4.4.9	Mempelajari reaksi bersaing siklisasi dan pembentukan dimetil asetal sitronelal dengan metanol-gas HCl	60
4.4.10	Optimasi struktur	61
4.4.10.1	Menentukan himpunan basis (basis set)	61
4.4.10.2	Optimasi struktur pereaksi dan produk reaksi teridentifikasi	61
4.4.10.3	Struktur keadaan transisi dan zat antara	62
4.5	Analisis Data	62
4.5.1	Analisis data eksperimen.	62
4.5.2	Analisis data komputasi	63



4.5.2.1	Selektivitas serangan elektrofil kompleks asam Lewis-anhidrida asam asetat terhadap ikatan tak jenuh sitronelal.	64
4.5.2.2	Penentuan struktur keadaan transisi dan zat antara pembentukan isopulegil asetat (IPA)	64
4.5.2.3	Isomerisasi senyawa antara diena, terpinolena	64
4.5.2.4	Diagram energi	65
BAB V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	66
5.1	Isolasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dari Minyak Sereh dan Analisis Rasio Enantiomernya dengan GC Berkolom Kiral β -DEX-225	66
5.1.1	Isolasi sitronelal dari minyak sereh	66
5.2	Penentuan rasio enantiomer sitronelal dengan GC kolom kiral β -DEX-225	71
5.3	Preparasi Katalis Zeolit alam Termodifikasi	73
5.3.1	Aktivasi zeolit alam	74
5.3.2	Karakterisasi katalis zeolit alam termodifikasi	75
5.3.2.1	Penentuan kandungan logam/kation dalam sampel katalis	75
5.3.2.2	Penentuan keasaman katalis	76
5.3.2.3	Porositas katalis	78
5.3.2.4	Hasil analisis XRD	79
5.3.2.5	Penentuan rasio Si/Al	80
5.3.2.6	Hasil analisis SEM dan TEM	81
5.4	Siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat/ ZnCl_2	83
5.4.1	Pengaruh temperatur pada siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ ZnCl_2	83
5.4.2	Hasil isolasi produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal terkatalis ZnCl_2	89
5.4.3	Hasil optimasi struktur stereoisomer isopulegil asetat	91
5.5	Siklisasi-Asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat/ FeCl_3	93
5.5.1	Pengaruh temperatur reaksi terhadap aktivitas dan selektivitas katalis	93
5.5.2	Distribusi produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ FeCl_3 pada variasi durasi reaksi	95
5.5.3	Pengaruh rasio mol pereaksi terhadap produk reaksi	96
5.5.4	Isolasi <i>p</i> -simena dan sitronelil asetat dengan kromatografi kolom	97
5.5.5	Dugaan mekanisme reaksi pembentukan <i>p</i> -simena dan sitronelil asetat	103

5.6	Siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Katalis H-Za	107
5.6.1	Pengaruh temperatur terhadap aktivitas dan selektivitas katalis H-Za	107
5.6.2	Pengaruh durasi reaksi terhadap distribusi produk reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan katalis H-Za	108
5.6.3	Konversi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal menjadi isopulegol	110
5.7	Siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Katalis Fe ³⁺ -Za	112
5.7.1	Pengaruh temperatur terhadap aktivitas dan selektivitas katalis Fe ³⁺ -Za	112
5.7.2	Pengaruh durasi reaksi terhadap produk reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan katalis Fe ³⁺ -Za	115
5.7.3	Pengaruh rasio pereaksi terhadap aktivitas dan selektivitas katalis Fe ³⁺ -Za	116
5.8	Siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Katalis Zn ²⁺ -Za	117
5.8.1	Pengaruh temperatur dan durasi reaksi terhadap distribusi produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan katalis Zn ²⁺ -Za	117
5.8.2	Kinetika siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan katalis Zn ²⁺ -Za (<i>R</i>)-(+)-sitronelal menggunakan katalis Zn ²⁺ -Za	118
5.9	Rangkuman Aktivitas dan Stereoslektivitas Katalis Reaksi Siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal	126
5.10	Reaksi Bersaing Siklisasi dan Pembentukan Asetal Stronelal dengan Metanol-Gas HCl	128
5.10.1	Sintesis dimetil asetal sitronelal dengan gas HCl sebagai katalis.	128
5.10.2	Sintesis dimetil asetal sitronelal dengan metanol-aliran gas HCl dan isolasinya	131
5.11	Kajian Mekanisme Reaksi Siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal	135
5.11.1	Siklisasi karbonil ena dengan mekanisme Ena atau Alder-Ena	136
5.11.2	Siklisasi karbonil ena dengan mekanisme Prins	140
5.11.3	Mekanisme reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal	141
5.11.4	Mekanisme reaksi siklisasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal menjadi isopulegol	146
5.12	Kajian Teoritis Reaksi Siklisasi-Asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Metode DFT	152
5.12.1	Pemilihan himpunan basis (basis set)	152



UNIVERSITAS
GADJAH MADA

Kajian reaksi Siklisasi-Asetilasi (R)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat Dikatalisis Asam Lewis dan Zeolit Alam Termodifikasi
CAHYONO, Edy, Promotor Prof.(ret). Dr. Muchalal, DEA
Universitas Gadjah Mada, 2010 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

5.12.2	Optimasi struktur spesi reaksi siklisasi-asetilasi (R)-(+)-sitronelal	153
5.12.2.1	Optimasi keadaan transisi I (KT I)	154
5.12.2.2	Optimasi hasil antara I (HA I)	155
5.12.2.3	Optimasi keadaan transisi II (KT II)	156
5.12.2.4	Optimasi hasil antara II (HA II)	157
5.12.2.5	Optimasi keadaan transisi III (KT III)	157
5.12.2.6	Optimasi struktur IPA dan NIPA	158
5.12.3	Diagram energi reaksi siklisasi-asetilasi (R)-(+)-sitronelal	159
BAB VI	KESIMPULAN DAN SARAN	164
6.1	Kesimpulan	164
6.2	Saran	165
DAFTAR PUSTAKA		167
LAMPIRAN		173

DAFTAR TABEL

	hal
Tabel 2.1 Perbandingan antara kemisorpsi dan fisisorpsi (Kolasinski, 2002)	19
Tabel 2.2 Jenis-jenis zeolit dan karakteristiknya	26
Tabel 2.3 Donicity Gutmann (DNSbCl ₃) beberapa pelarut	31
Tabel 3.1 Harga potensial reduksi H ⁺ /H ₂ dalam beberapa pelarut. Konsentrasi 1 mol/kg pelarut, T = 25 °C (Trémillon, 1993).	44
Tabel 3.2 Konsentrasi situs asam Brønsted dan Lewis dalam berbagai katalis (Arvela <i>et al.</i> , 2004)	45
Tabel 4.1 Parameter eksperimen reaksi siklisasi-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat menggunakan katalis zeolit alam termodifikasi	57
Tabel 5.1 Massa per muatan (m/z) fragmen-fragmen komponen utama minyak sereh	66
Tabel 5.2 Bilangan gelombang spektrum inframerah (IR) gugus fungsi citronelal hasil isolasi (F IIR)	66
Tabel 5.3 Sudut putar bidang polarisasi, kandungan citronelal, berat jenis dan indeks bias minyak sereh dan citronelal	68
Tabel 5.4 Kuantitas kation Fe ³⁺ dan Zn ²⁺ teradsorpsi pada katalis Fe ³⁺ -Za dan Zn ²⁺ -Za, diukur dengan AAS	78
Tabel 5.5 Keasaman zeolit alam, H-Za, Fe ³⁺ -Za dan Zn ²⁺ -Za berdasar jumlah mmol piridin teradsorpsi	80
Tabel 5.6 Porositas padatan zeolit alam, H-Za, Fe ³⁺ -Za dan Zn ²⁺ -Za	81
Tabel 5.7 Kadar Al dan Si sebagai Al ₂ O ₃ dan SiO ₂ pada zeolit alam dan H-Za	84
Tabel 5.8 Kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada temperatur 80 °C, rasio mol citronelal:anhidrida asam asetat:ZnCl ₂ = 6:12:1	88
Tabel 5.9 Massa/muatan (m/z) fragmen-fragmen produk siklisasi-asetilasi (R)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada 30 °C dan durasi 180 menit.	90
Tabel 5.10 Massa/muatan (m/z) fragmen-fragmen produk siklisasi-asetilasi (R)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada 80 °C dan durasi 30 menit	91
Tabel 5.11 Energi relatif isomer pulegol dan konformernya	92
Tabel 5.12 Hasil reaksi siklisai-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat/FeCl ₃ di berbagai temperatur dan rasio mol pereaksi	94
Tabel 5.13 Kuantitas produk reaksi citronelal dengan anhidrida asam asetat/FeCl ₃ pada 80 °C, rasio mol 2:6:1	96
Tabel 5.14 Hasil kromatografi kolom produk reaksi (R)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asetat/FeCl ₃ pada 80 °C, durasi 180 menit dan rasio mol 2:6:1	98



Tabel 5.15	Analisis GC-MS produk siklisasi-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat/ FeCl_3 pada temperatur 80 °C dan durasi 180 menit	100
Tabel 5.16	Kuantitas (%) isopulegol hasil samping siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan katalis zeolit alam termodifikasi	110
Tabel 5.17	Kuantitas produk, konversi dan stereoselektivitas reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan katalis Zn^{2+} -Za pada 80 °C.	118
Tabel 5.18	Konversi, hasil IPA-NIPA total dan stereoselektivitas reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat pada berbagai rasio mol SIT/AA dikatalisis Zn^{2+} -Za	120
Tabel 5.19	Hasil analisis $(1/R)[\text{SIT}]/[\text{AA}]$ lawan $[\text{SIT}]/[\text{AA}]$ tiap durasi reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ Zn^{2+} -Za	124
Tabel 5.20	Rangkuman aktivitas dan stereoselektivitas katalis untuk reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal pada kondisi maksimalnya	126
Tabel 5.21	Massa/muatan (<i>m/z</i>) fragmen-fragmen produk sintesis asetal dari citronelal dengan metanol-gas HCl pada durasi 24 jam, 30 °C.	128
Tabel 5.22	Hubungan kuantitas asetal citronelal (%) dengan massa CaCl_2 , temperatur dan durasi reaksi citronelal dengan metanol-gas HCl.	129
Tabel 5.23	Energi aktivasi (<i>E_a</i>) tiap tahap pembentukan IPA dan NIPA	159

DAFTAR GAMBAR

	hal
Gambar 2.1	Kurva laju reaksi (Andrew dan Rispoli, 1998) 22
Gambar 2.2	Grafik keadaan transisi 35
Gambar 5.1	Kromatogram minyak sereh 66
Gambar 5.2	Kromatogram (a) hasil redistilasi (F IIR) dan (b) citronelal baku B 68
Gambar 5.3	Spektra inframerah (IR) (a) citronelal hasil redistilasi (F IIR) dan (b) (<i>R</i>)-(+)-sitronelal baku C 69
Gambar 5.4	Spektra ¹ H NMR (a) citronelal hasil redistilasi (F IIR) dan (b) (<i>R</i>)-(+)-sitronelal baku C 70
Gambar 5.5	Struktur heptakis(2,3-di-O-asetil-6-O- <i>tert</i> -butildimetilsilil) - β- siklodekstrin (β-DEX-225) 72
Gambar 5.6	Kromatogram GC kolom kiral β-DEX-225: (a) citronelal F IIR, (b) (<i>R</i>)-(+)-sitronelal baku C dan (c) (+)/(-)-sitronelal baku A. 73
Gambar 5.7	Hubungan kuantitas NH ₃ terdesorpsi dari katalis H-Za, Fe ³⁺ -Za dan Zn ²⁺ -Za dengan temperatur pemanasan 76
Gambar 5.8	Difraktogram (a) zeolit alam Malang, (b) H ⁺ -Za, (c) Fe ³⁺ -Za, (d) Zn ²⁺ -Za dan (e) difraktogram pembanding mordenit sintetis (Herna'ndez <i>et al.</i> , 2000) 80
Gambar 5.9	Mikrograf SEM kristal Fe ³⁺ -Za (a) dan Zn ²⁺ -Za (b) pada perbesaran 50.000x 82
Gambar 5.10	Mikrograf TEM kristal Zn ²⁺ -Za 83
Gambar 5.11	Kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada variasi temperatur dan durasi 180 menit 84
Gambar 5.12	Kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada 80 °C 86
Gambar 5.13	Kromatogram produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada 30 °C dan durasi 180 menit 86
Gambar 5.14	Kromatogram GC hasil isolasi IPA dan NIPA. 89
Gambar 5.15	Spektrum IR fraksi II-P1 distilasi fraksinasi produk siklisasi-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat/ZnCl ₂ pada 80 °C dan durasi 180 menit 90
Gambar 5.16	Spektrum ¹ H-NMR fraksi II-P1 hasil distilasi fraksinasi produk reaksi pada 80 °C, 180 menit 90
Gambar 5.17	Struktur molekul konformer isopulegil asetat turunan (<i>R</i>)-(+)-sitronelal (metode semiempiris AM1) 92
Gambar 5.18	Kromatogram hasil distilasi fraksinasi pengurangan tekanan produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/FeCl ₃ pada 30 °C, selama 180 menit, rasio mol 6:12:1 94



Gambar 5.19	Kuantitas (%) produk reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan durasi reaksi pada 30 °C, rasio mol 6:12:1	95
Gambar 5.20	Distribusi produk reaksi citronelal dengan anhidrida asam asetat/ FeCl_3 pada 80 °C, rasio mol 2:6:1	97
Gambar 5.21	Spektrum infra merah fraksi 3 hasil kromatografi kolom	99
Gambar 5.22	Kromatogram (a) fraksi 3 hasil kromatografi kolom dan (b) spiking produk reaksi citronelal dengan FeCl_3 pada 80°C selama 180 menit dengan <i>p</i> -simena baku (ELB).	99
Gambar 5.23	Kromatogram fraksi 6 hasil kromatografi kolom produk siklisasi-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat/ FeCl_3 pada temperatur 80 °C dan durasi 180 menit.	101
Gambar 5.24	Spektrum infra merah fraksi 6 hasil kromatografi kolom	102
Gambar 5.25	Kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal terkatalis H-Za pada variasi temperatur reaksi, durasi 180 menit	108
Gambar 5.26	Hubungan kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal terkatalisis H-Za dengan durasi reaksi	109
Gambar 5.27	Hubungan kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal terkatalis Fe^{3+} -Za dengan temperatur reaksi (durasi 180 menit)	113
Gambar 5.28	Kroatogram GC hasil reaksi siklisasi-asetilasi citronelal dengan anhidrida asam asetat/ Fe^{3+} -Za pada (a) 0 °C , (b) 30 °C dan (c) 80 °C durasi 180 menit	114
Gambar 5.29	Hubungan kuantitas(%) produk siklisasi-asetilasi citronelal terkatalisis Fe^{3+} -Za dengan durasi reaksi pada 80 °C	115
Gambar 5.30	Produk siklisasi-asetilasi citronelal dengan katalis Fe^{3+} -Za pada 80 °C dan rasio pereaksi mL citronelal : mL anhidrida asam asetat: g katalis berturut-turut: (a) 7:7,1:1 ; (b) 7:4,7:0,5 dan (c) 7:5,7:0,25	116
Gambar 5.31	Hubungan kuantitas (%) produk siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal terkatalis Zn^{2+} -Za dengantemperatur reaksi (durasi 180 menit)	117
Gambar 5.32	Hubungan kuantitas produk dengan durasi reaksi siklisasi-asetilasi citronelal dengan katalis 1 g Zn^{2+} -Za, pada 80 °C dan rasio mol citronelal/anhidrida asam asetat (SIT/AA): a) 0,25 ; b) 0,5 ; c) 1 ; d) 1,25 ; dan e) 1,5	121
Gambar 5.33	Hubungan persentase yield IPA-NIPA dengan durasi reaksi dari berbagai rasio mol SIT/AA pada reaksi siklisasi-asetilasi (<i>R</i>)-(+)-sitronelal menggunakan katalis Zn^{2+} -Za	122
Gambar 5.34	Hubungan laju reaksi (mmol IPA-NIPA/menit. g katalis) dengan rasio mol (<i>R</i>)-(+)-sitronelal dengan anhidrida asam asetat/ Zn^{2+} -Za	123
Gambar 5.35	Fragmentasi dimetil asetal oktadek-9-en-1-al (The Lipid Library, 2007)	129
Gambar 5.36	Kromatogram (a) produk reaksi citronelal dengan metanol- gas HCl, pada 30 °C durasi 24 jam; (b) produk reaksi	131

	sitronelal dengan metanol-gas HCl, pada 30 °C durasi 48 jam; (c) fraksi II hasil distilasi fraksinasi produk reaksi citronelal dengan metanol-gas HCl, pada 30 °C durasi 48 jam	
Gambar 5.37	Spektra infra merah (IR) (a) produk reaksi citronelal dengan metanol-gas HCl pada 30° C 48 jam dan (b) fraksi II hasil distilasi fraksinasi produk	132
Gambar 5.38	Spektrum ¹ H-NMR dimetil asetal citronelal hasil distilasi fraksinasi	133
Gambar 5.39	Tumpangtuh HOMO dari diena dengan LUMO dari dienofil	137
Gambar 5.40	Tumpangtuh HOMO dari dienofil dengan LUMO dari diena	139
Gambar 5.41	Tumpangtuh HOMO dengan LUMO pada reaksi Diles-Alder dan reaksi Ena	139
Gambar 5.42	Kromatogram hasil reaksi (R)-(+)-sitronelal dengan a) anhidrida asam asetat, b) FeCl ₃ , c) H-Za, d) Fe ³⁺ -Za dan e) anhidrida asam asetat/Fe ³⁺ -Za	142
Gambar 5.43	Spektra infra merah a) zeolit alam-piridina, b) H-Za-piridina, c) Fe ³⁺ -Za-piridina dan d) Zn ²⁺ -Za-piridina	149
Gambar 5.44	Spektra IR (R)-(+)-sitronelal hasil perhitungan dengan himpunan basis STO-3G, 3-21G dan 6-31G	153
Gambar 5.45	Struktur keadaan transisi (a) serangan asetil pada ikatan C=C dan (b) serangan asetil pada ikatan C=O (R)-(+)-sitronelal	154
Gambar 5.46	Struktur keadaan transisi I hasil optimasi dengan metode DFT/B3LYP dan himpunan basis 3-21G dilanjutkan dengan perhitungan IRC	155
Gambar 5.47	Struktur keadaan hasil antara I hasil optimasi dengan metode DFT/B3LYP dan himpunan basis 3-21G	155
Gambar 5.48	Struktur (a) keadaan transisi II IPA dan (b) keadaan transisi II NIPA hasil optimasi dengan metode DFT/B3LYP dan himpunan basis 3-21G dilanjutkan dengan perhitungan IRC	156
Gambar 5.49	Struktur (a) hasil antara II IPA dan (b) hasil antara II NIPA hasil optimasi dengan metode DFT/B3LYP dan himpunan basis 3-21G	157
Gambar 5.50	Struktur (a) keadaan transisi III IPA dan (b) keadaan transisi III NIPA hasil optimasi dengan metode DFT/B3LYP dan himpunan basis 3-21G dilanjutkan dengan perhitungan IRC	158
Gambar 5.51	Struktur (a) IPA dan (b) NIPA hasil optimasi dengan metode DFT/B3LYP dan himpunan basis 3-21G	158
Gambar 5.52	Profil energi jalur pembentukan IPA dan NIPA	160
Gambar 5.53	Perubahan muatan atom spesi reaksi pada (a) jalur pembentukan IPA dan (b) jalur pembentukan NIPA	161
Gambar 5.54	Perubahan jarak antar atom spesi reaksi pada (a) jalur pembentukan IPA dan (b) jalur pembentukan NIPA	162

DAFTAR LAMPIRAN

	hal
Lampiran 1.	Disain Penelitian 173
Lampiran 2a	Skema Kerja Isolasi Sitronelal dari Minyak Sereh 174
Lampiran 2b	Skema Kerja Preparasi dan Karakterisasi Katalis Zeolit Alam Termodifikasi. 175
Lampiran 2c	Skema Kerja Siklisasi-Asetilasi Sitronelal dengan Katalis Asam Lewis dan Zeolit Alam TermodifikasiSeperangkat 176
Lampiran 3a	Seperangkat Alat Distilasi Fraksinasi Pengurangan Tekanan 177
Lampiran 3.b	Seperangkat Alat Refluks (Reakstor Siklisasi-Asetilasi) 178
Lampiran 3.c	Seperangkat Alat Kalsinasi Modifikasi Muchalal 179
Lampiran 3.d	Rangkaian Alat Uji Keasaman dengan Metode NH ₃ -TPD 180
Lampiran 3.e	Seperangkat Alat Reaktor Perlindungan Gugus Karbonil 181
Lampiran 4	Deskripsi Petrografi Batuan Zeolit Alam dari Turen Malang 182
Lampiran 5a	Difraktogram XRD Zeolit Alam dari Turen Malang 183
Lampiran 5b	Difraktogram XRD H-Za 184
Lampiran 5c	Difraktogram XRD Fe ³⁺ -Za 185
Lampiran 5d	Difraktogram XRD Zn ²⁺ -Za 186
Lampiran 6	Mikrograf SEM (a) Zeolit Alam dari Turen Malang, (b) H-Za, (c) Fe ³⁺ -Za, dan (d) Zn ²⁺ -Za pada Pebesaran 10.000 kali 187
Lampiran 7	Mikrograf Beberapa Kristal Mordenit Sintetis (Sharma <i>et al.</i> , 2008) 188
Lampiran 8	Mikrograf TEM Mordenit (a dan b) dan Mordenit yang Telah Mengalami Pertukaran Ion (c dan d) (Aguado <i>et al.</i> , 2009) 189
Lampiran 9	Kuantitas Produk, Konversi dan Stereoselektivitas Reaksi Siklisasi-Asetilasi Sitronelal dengan Katalis Fe ³⁺ -Za pada 80 °C dan Variasi Rasio Jumlah Pereaksi 190
Lampiran 10	Kuantitas Produk, Konversi dan Stereoselektivitas Reaksi Siklisasi-Asetilasi Sitronelal dengan Katalis 1 g Zn ²⁺ -Za pada 80 °C dan Variasi Rasio Mol Sitronelal/Anhidrida Asam Asetat (SIT/AA) 191
Lampiran 11	Analisis Kinetika Reaksi Siklisasi-Asetilasi (R)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat/Zn ²⁺ -Za pada 80 °C 192
Lampiran 12	Spektra Massa Hasil Reaksi (R)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat/FeCl ₃ pada 30 °C, 180 menit 195
Lampiran 13	Spektra Massa Produk Siklisasi-Asetilasi (R)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat/FeCl ₃ pada 80 °C durasi 180 menit 198



UNIVERSITAS
GADJAH MADA

Kajian reaksi Siklisasi-Asetilasi (*R*)-(+)-Sitronelal dengan Anhidrida Asam Asetat Dikatalisis Asam Lewis dan Zeolit Alam Termodifikasi
CAHYONO, Edy, Promotor Prof.(ret). Dr. Muchalal, DEA
Universitas Gadjah Mada, 2010 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

Lampiran 14	Kuantitas IPA dan NIPA (%) Hasil Siklisasi-Asetilasi (<i>R</i>)-(+)-Sitronelal dengan Katalis Asam Lewis dan Zeolit Alam Termodifikasi pada 0, 30 dan 80 °C.	201
Lampiran 15	Faktor Skala Vibrasi IR pada Berbagai Himpunan Basis (Sumber: CCCBDB Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database.htm)	202