

**PERHITUNGAN MEKANISME REAKSI ASETALISASI
BENZALDEHIDA MENGGUNAKAN KATALIS
ASAM (HCl) DENGAN METODE
KOMPUTASI (*AB-INITIO*)**

Deby Elfrinasti Br Sitepu (4123210007)

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian tentang perhitungan mekanisme reaksi asetalisasi benzaldehida menggunakan katalis asam (HCl) dengan metode komputasi (*Ab-Initio*). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui energi tiap tahapan reaksi asetalisasi benzaldehida. Perhitungan mekanisme dilakukan menggunakan metode ab initio dari hyperchem versi 8.0 dengan basis set 3-21G dan 6-31G*. Hasil perhitungan energi tiap tahapan reaksi asetalisasi selalu mengalami perubahan. Tahap awal pembentukan *Benzylideneoxonium* memiliki selisih energi dengan benzaldehid sebesar 468,2204 kJ/mol dan 517,5909 kJ/mol tahap terakhir pembentukan *Benzaldehyde-dimethyl-acetal* memiliki selisih energi dengan benzaldehida sebesar -51,9294 kJ/mol dan -6,8003 kJ/mol. Selisih energi tertinggi pada tahap pembentukan *Methoxy-phenyl-methanol* yaitu 1299,2017 kJ/mol dan 1399,6171 kJ/mol serta selisih energi terendah terjadi pada tahap *Benzaldehyde-dimethyl-acetal*.

Kata kunci : Asetalisasi, Benzaldehida, HCl, Komputasi, *Ab Initio*