

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

Ahmad Kamil Nasution (4132210014)

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian tentang perhitungan mekanisme reaksi asetalisasi 2-hidroksi benzaldehida menggunakan katalis asam (HCl) dengan metode komputasi (*ab initio*). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui energi tiap tahapan reaksi asetalisasi 2-hidroksi benzaldehida. Perhitungan dilakukan dengan metode *ab initio* dari *HyperChem* versi 8.0 dengan *basis set* 3-21G dan 6-31G*. Hasil perhitungan energi optimasi menunjukkan reaksi asetalisasi 2-hidroksi benzaldehida berlangsung reversibel. Tahap awal pembentukan *2-Hydroxy-benzylidene-oxonium* memiliki selisih energi dengan 2-hidroksi benzaldehida sebesar 462,8498 kJ/mol dan 512,9354 kJ/mol, tahap akhir pembentukan *salicylaldehyde-dimethyl-acetal* memiliki selisih energi dengan 2-hidroksi benzaldehida sebesar 28,7427 kJ/mol dan 65,3253 kJ/mol. Selisih energi tertinggi pada tahap pembentukan *2-Hydroxymethyl-phenol* yaitu 478,419 kJ/mol dan 530,9409 kJ/mol dan selisih energi terendah terjadi pada tahap *salicylaldehyde-dimethyl-acetal*.

Kata kunci: Asetalisasi, 2-hidroksi benzaldehida, HCl, komputasi, *ab initio*