

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

DAHNIAR (4132210002)

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian tentang perhitungan mekanisme reaksi asetalisasi 2-metoksi benzaldehida menggunakan katalis asam (HCl) dengan metode komputasi (*ab initio*). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui energi tiap tahapan reaksi asetalisasi 2-metoksi benzaldehida. Perhitungan dilakukan dengan metode *ab initio* dari *HyperChem* versi 8.0 dengan *basis set* 3-21G dan 6-31G\*. Hasil perhitungan energi tiap tahapan selalu mengalami perubahan. Tahap awal pembentukan 2-Methoxy-benzylidene-oxonium memiliki selisih energi dengan 2-metoksi benzaldehida sebesar 423,27 kJ/mol dan 472,90 kJ/mol, tahap akhir pembentukan 1-Dimethoxymethyl-2-methoxy-benzene memiliki selisih energi dengan 2-metoksi benzaldehida sebesar -57.91 kJ/mol dan -17.43 kJ/mol. Selisih energi tertinggi pada tahap pembentukan 2-metoksi benzaldehida yaitu 423.28 kJ/mol dan 472.90 kJ/mol dan selisih energi terendah terjadi pada tahap 1-Dimethoxymethyl-2-methoxy-benzene.

**Kata kunci:** Asetalisasi, 2-Metoksi Benzaldehida, HCl, Komputasi, *Ab Initio*