

# 3-HIDROKSI BUTANAL SEBAGAI PRODUK SAMPING HIDROFORMILASI ALIL ALKOHOL TERKATALISIS KOMPLEKS KOBALT KARBONIL: SUATU KASUS DALAM PEMBELAJARAN KIMIA KOMPUTASI

Soni Setiadji<sup>1</sup>, Nunung Kurniasih<sup>2</sup>, Tina Dewi Rosahdi<sup>3</sup>, Assyifa Junitasari<sup>4</sup> dan Husni Trihermanto<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Jurusan Kimia, UIN Sunan Gunung Djati Bandung, s.setiadji@uinsgd.ac.id

<sup>2</sup>Jurusan Kimia, UIN Sunan Gunung Djati Bandung, nunungkurniasih@uinsgd.ac.id

<sup>3</sup>Jurusan Kimia, UIN Sunan Gunung Djati Bandung, tina\_dr@uinsgd.ac.id

<sup>4</sup>Jurusan Kimia, UIN Sunan Gunung Djati Bandung, assyifajunitasari@uinsgd.ac.id

<sup>5</sup>Jurusan Kimia, UIN Sunan Gunung Djati Bandung

## Abstrak

Studi komputasi mekanisme reaksi hidroformilasi alil alkohol yang terkatalisis kompleks  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  menjadi 3-hidroksi butanal melalui beberapa tahap. Struktur hipotesis reaktan, zat antara dan produk dibuat secara komputasi. Mekanisme yang di usulkan terdiri dari pembentukan spesi aktif katalis  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ , koordinasi alil alkohol ke  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ , penyisipan 2,1 alil alkohol terhadap ikatan Co-H, karbonilasi, adisi oksidatif dan eliminasi reduktif. Untuk perhitungan menggunakan perangkat lunak *Firefly 8.1* dengan metode DFT (*Density Functional Theory*). Hasil perhitungan menunjukkan energi tertinggi terjadi pada tahap pemutusan satu ligan CO membentuk spesi aktif katalis  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  sebesar + 161,80 kJ/mol. Energi hasil perhitungan pada struktur produk samping 3-hidroksi butanal sebesar - 181,49 kJ/mol. Berdasarkan perhitungan energi bahwa struktur hipotesis yang diusulkan pada mekanisme hidroformilasi alil alkohol terkatalisis kompleks kobalt karbonil dapat membentuk produk samping 3-hidroksi butanal.

**Kata kunci:** 3-hidroksi butanal; alil alkohol; DFT; hidroformilasi; 4-hidroksi butanal;  $\text{HCo}(\text{CO})_4$

## Abstract

In this computational studies, reaction mechanism of allyl alcohol hydroformylation is catalyzed by  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  complex into 3-hydroxy butanal consist of several stages. Hypothesis structure of reactant, intermediates and products are prepared by computational. The proposed mechanism consists of formed active species of  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ , coordination of allyl alcohol toward  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ , 2.1 allyl alcohol insertion on Co-H bond, carbonylation, oxidative addition, and reductive elimination. All structures was determined using the *Firefly 8.1* software with DFT (*Density Functional Theory*) method. From all calculation results shown that highest energy of +161.80 kJ / mol occurs when breaking stage to one of CO ligand to form an active catalyst  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ . While the energy was produced by the structure of 3-hydroxy butanal as side products is -181.49 kJ / mol. Based on energy calculations that the hypothesize structure were proposed at the mechanism of allyl alcohol hydroformylation catalyzed of cobalt carbonyl complexes could be form the product of butanal 3-hydroxy.

**Keyword:** 3-hydroxy butanal; alil alcohol; density function theory; hydroformylation

## 1 Pendahuluan

Biomassa merupakan sumber energi terbarukan yang mengacu pada bahan biologis yang hidup atau baru mati yang dapat digunakan sebagai sumber bahan bakar atau produksi industrial. Umumnya biomassa merujuk pada materi tumbuhan yang dipelihara untuk digunakan sebagai biofuel, tetapi dapat juga mencakup materi tumbuhan atau hewan yang digunakan untuk produksi serat, bahan kimia, dan panas. Biomassa dari materi tumbuhan yang bisa diperoleh dalam jumlah besar adalah minyak kelapa [1-4].

Pada minyak kelapa terkandung senyawa gliserol yang umumnya digunakan sebagai bahan dasar untuk sintesis senyawa lain. Salah satu kegunaan gliserol dapat kita jumpai pada pembuatan bioplastik (plastik ramah lingkungan) dengan produk senyawa kimia berupa poli-4-hidroksibutirat. Terkait hal itu gliserol tidak hanya digunakan sebagai bahan dasar pembuatan plastik saja. Adapun kegunaan lainnya adalah sebagai bahan dasar pembuatan kosmetik, alkyd resin, polyurethanes dan bahan dasar obat-obatan [2-5].

Salah satu kegunaan gliserol pada bidang farmasi yaitu sebagai bahan untuk sintesis alil alkohol dengan cara mendehidrasi gliserol dengan asam formiat [6]. Alil alkohol yang didapat akan digunakan sebagai reaktan pada tahapan mekanisme hidroformilasi dengan katalis kompleks kobalt karbonil dalam memperoleh produk 3-hidroksi butanal yang berfungsi sebagai obat sedatif dan penenang. Adapun tahapan-tahapan mekanismenya terdiri dari pembentukan katalis aktif  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ , koordinasi alil alkohol, penyisipan 2,1 dan adisi CO, karbonilasi, adisi oksidatif dan eliminasi reduktif.

Pada studi komputasi kimia untuk menentukan konformasi struktur hipotesis yang dibuat diperangkat lunak Avogadro diperlukan prediksi struktur secara geometri. Sedangkan untuk mengetahui struktur mana yang lebih disukai secara termodinamika dilakukan studi secara energetika. Studi yang digunakan yaitu dengan perhitungan komputasi kimia pada perangkat lunak Firefly 8.1. Metode yang digunakan adalah density functional theory (DFT) dengan basis set elektron valensi terpisah (6-31g(d,p)). Teori fungsi kerapatan (DFT, Density functional theory) merupakan salah satu dari beberapa pendekatan populer untuk perhitungan struktur elektron banyak partikel secara mekanika kuantum untuk sistem molekul dan bahan rapat [7-12].

Hidroformilasi ditemukan oleh Otto Roelen pada tahun 1938 selama penyelidikan tentang asal-usul produk oksigen yang terjadi pada reaksi Fischer-Tropsch dengan katalis kobalt. Pengamatan Roelen bahwa etilena,  $\text{H}_2$  dan CO dikonversi menjadi propanal, dan pada tekanan yang lebih tinggi menjadi dietil keton, menandai awal hidroformilasi. Penelitian Roelen tentang hidroformilasi melibatkan penggunaan garam kobalt [13-15].

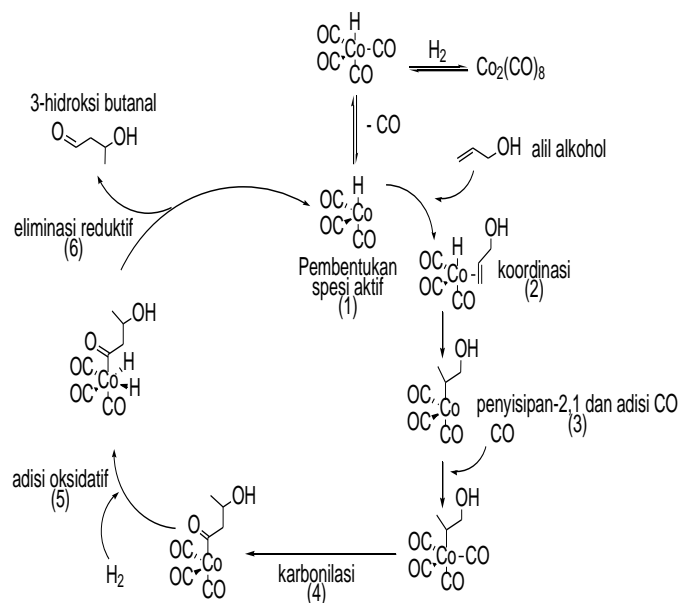
Tetrakarbonil hidrido kobalt  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  logam transisi yang banyak digunakan di industri. Pada tahun 1953 diungkapkan bahwa  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  adalah katalis aktif untuk konversi alkena, CO dan  $\text{H}_2$  menjadi aldehid, yang dikenal dengan proses hidroformilasi. Tercatat aldehida yang dihasilkan dari konversi alkena oleh katalis  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  adalah sekitar 100.000 ton/tahun [16-20].

Banyak penelitian hidroformilasi alil alkohol yang telah dilakukan dengan menggunakan katalis logam yang menghasilkan 4-hidroksi butanal sebagai hasil utama maupun 3-hidroksi

butanal sebagai hasil samping. Penelitian tersebut dilakukan dengan metode basah yang artinya dilakukan di laboratorium menggunakan bahan dan alat skala laboratorium. Melihat dari hal tersebut penelitian mengenai hidroformilasi alil alkohol yang telah ada terutama yang menghasilkan 3-hidroksi butanal terkatalis kobalt dapat dilakukan secara komputasi. Penelitian secara komputasi ini sangat penting dilakukan, karena hasil penelitian dengan metode komputasi dapat dijadikan sebagai acuan atau gambaran awal untuk penelitian skala laboratorium basah.

## 2 Metodologi

Struktur-struktur senyawa hipotesis reaktan zat antara dan produk yang terdapat pada Gambar 1 dibuat pada perangkat lunak avogadro. Kemudian dibuat file input nya untuk melakukan tahap perhitungan pada perangkat lunak Firefly 8.1 dengan metode DFT basis set 6-31g(d,p), setelah itu akan didapat file output yang akan dianalisis pada perangkat lunak Chemcraft. Data yang diambil adalah energi total untuk masing-masing struktur.



Gambar 1. Usulan mekanisme reaksi hidroformilasi alil alkohol.

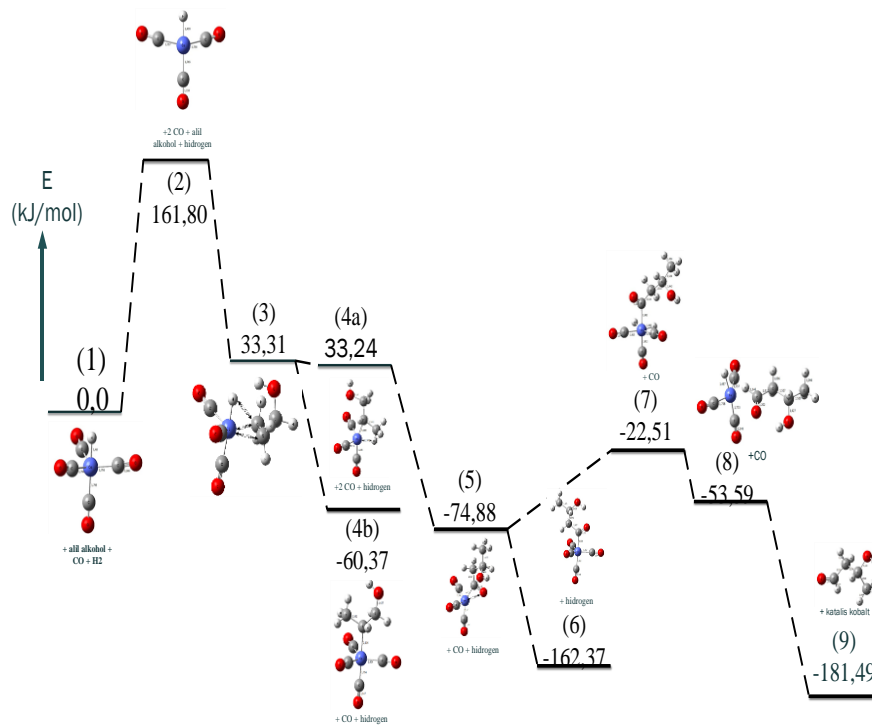
## 3 Hasil dan Pembahasan

### 3.1 Diagram Tingkat Energi Reaksi Hidroformilasi Alil Alkohol

Untuk mengetahui energi elektronik yang dihasilkan oleh reaktan, zat antara dan produk maka dilakukan perhitungan secara komputasi dengan bantuan perangkat lunak Firefly 8.1 menggunakan metode DFT B3LYP basis set 6-31g(d,p). Pemilihan metode DFT disebabkan bahwa dalam keadaan dasar energi elektronik dapat dinyatakan dalam rapat kebolehjadian elektron [21-23]. Sedangkan pemilihan basis set 6-31g(d,p) merupakan basis set valensi terpisah yang menggunakan orbital tipe slater yang memiliki kemampuan menerangkan sifat orbital pada jarak pendek maupun panjang. Pada basis set tersebut terdapat fungsi d untuk atom-atom berat dan p untuk hidrogen [7].

Dalam membuat diagram tingkat energi molekul reaktan, zat antara dan produk, maka diperlukan energi pembanding. Tingkat energi pembanding yang digunakan adalah energi dari katalis  $\text{HCo}(\text{CO})_4$ . Tingkat energi masing-masing molekul yang ada pada mekanisme

reaksi ini harus memiliki kesamaan jumlah atom. Adapun jumlah energi untuk masing-masing molekul hasil perhitungan perangkat lunak Firefly 8.1 yang dibuat dalam diagram tingkat energi dapat dilihat pada Gambar 2.

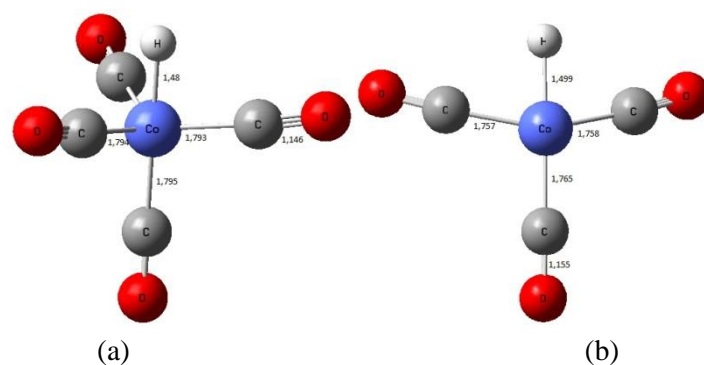


**Gambar 2.** Diagram energi mekanisme reaksi hidroformilasi alil alkohol dengan produk aldehid rantai cabang.

### 3.2 Katalis $\text{HCo}(\text{CO})_4$ dan Pembentukan $\text{HCo}(\text{CO})_3$

Pembentukan katalis kobalt tetrakarbonil hidrida ( $\text{HCo}(\text{CO})_4$ ) dan katalis aktif  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  merupakan tahap awal pada penelitian reaksi hidroformilasi alil alkohol. Senyawa kompleks  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  dengan geometri bipiramida trigonal dengan atom H pada posisi aksial memberikan struktur yang lebih stabil dikarenakan interaksi orbital dari atom H (hidrida) dan orbital  $\text{Co}(\text{CO})_4$  saling menstabilkan sehingga memberikan rintangan sterik terkecil [24].

Pelepasan salah satu ligan CO dalam struktur  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  pada posisi ekuatorial menjadikan katalis aktif  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  yang didapat menjadi kurang stabil. Sehingga memudahkan penyerangan dari nukleofil untuk membentuk ikatan. Hasil optimasi geometri  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  dan  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  diberikan pada gambar dibawah ini dengan panjang ikatan antar atom dalam ( $\text{\AA}$ ).

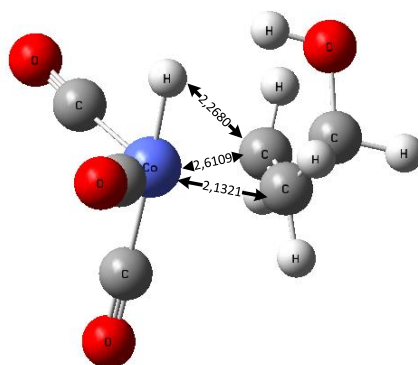


**Gambar 3.** Struktur  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  (a) dan  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  (b) hasil optimasi dengan panjang ikatan dalam (Å).

Hasil perhitungan energi yang didapat pada struktur  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  dengan perhitungan perangkat lunak Firefly 8.1 menghasilkan energi disosiasi CO sebesar 161,80 kJ/mol.

### 3.3 Koordinasi Alil Alkohol

Pada tahap ini terjadi koordinasi antara ikatan rangkap alil alkohol dengan katalis aktif  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  yang akan membentuk ikatan. Ikatan yang terbentuk antara alil alkohol dengan  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  dapat berupa ikatan  $\pi$ . Koordinasi alil alkohol menuju atom kobalt dibuat sejajar ikatan Co-H. Hal ini dilakukan untuk mendapatkan aldehid rantai cabang. Adapun strukturnya dapat dilihat pada Gambar 4.



**Gambar 4.** Ikatan rangkap alil alkohol sejajar ikatan Co-H.

Keterangan pada gambar diatas menunjukkan jarak koordinasi antara alil alkohol dengan katalis aktif  $\text{HCo}(\text{CO})_3$  dalam Å. Adapun hasil perhitungan perangkat lunak Firefly 8.1 jumlah energi untuk struktur koordinasi memiliki energi 128,49 kJ/mol lebih rendah dari pada struktur  $\text{HCo}(\text{CO})_3$ .

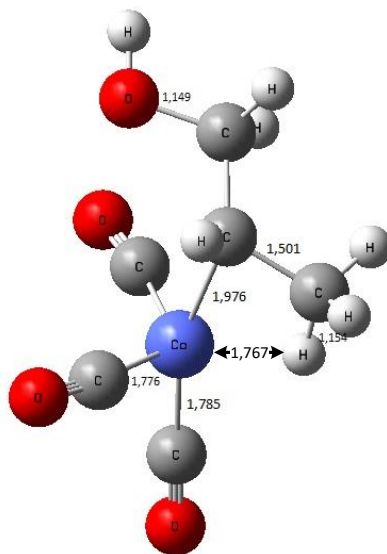
### 3.4 Penyisipan 2,1 Alil Alkohol

Pada tahap penyisipan mekanisme hidroformilasi alil alkohol untuk mendapatkan 3-hidroksi butanal berupa rantai cabang, maka dilakukan penyisipan 2.1. Penyisipan ikatan rangkap alil alkohol dengan hidrogen pada ikatan Co-H ini akan membentuk ikatan antara atom kobalt dengan alkil. Adapun strukturnya dapat dilihat pada Gambar 5.

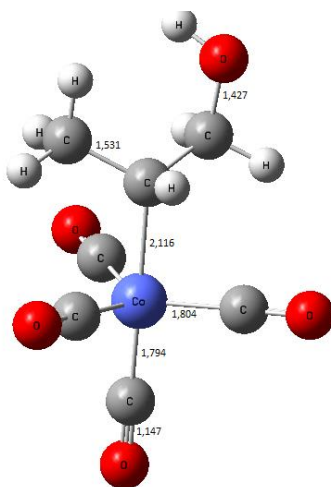
Pada struktur diatas menunjukkan adanya ikatan yang terbentuk antara Co dengan karbon no 2, dengan adanya ikatan tersebut terjadi kekosongan elektron pada atom karbon no 3, sehingga atom karbon tersebut menarik atom H yang terikat pada Co untuk memenuhi kestabilan. Hal ini disebabkan oleh keelektronegatifan atom karbon lebih tinggi daripada atom Co. Dari hasil perhitungan perangkat lunak Firefly 8.1 jumlah energi produk penyisipan memiliki energi 0,07 kJ/mol lebih rendah dari pada struktur koordinasi.

Untuk menstabilkan kekosongan sisi ekuatorial pada kobalt maka dilakukan adisi CO yang akan membentuk ikatan antara logam dengan karbon bukan dengan oksigen, hal ini dikarenakan perbedaan muatan formal dan elektronegativitas pada atom CO saling meniadakan, sehingga terdapat momen dipol yang kecil dengan kutub negatif di atom karbon. Selain itu, elektronegativitas karbon yang lebih rendah dari oksigen akan menghasilkan awan elektron yang lebih baur, sehingga terjadi penambahan momen dipol [25]. Adanya adisi CO

pada posisi ekuatorial terhadap katalis kobalt, struktur diatas akan menjadi lebih stabil, dapat dilihat pada Gambar 6.



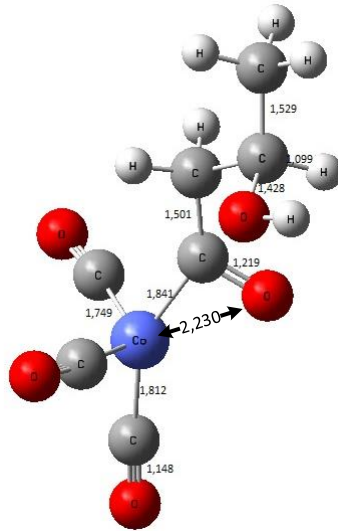
**Gambar 5.** Produk penyisipan 2,1 alil alkohol



**Gambar 6.** Tahap akhir penyisipan 2,1 alil alkohol.

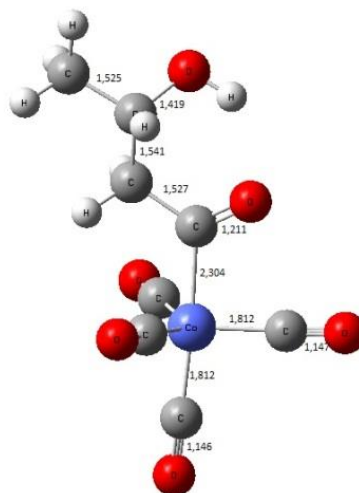
### 3.5 Karbonilasi

Struktur yang memiliki peluang untuk mengalami karbonilasi yaitu struktur yang ada pada Gambar 6, hal ini dikarenakan struktur tersebut lebih stabil dibandingkan struktur yang ada pada Gambar 5. Pada tahap karbonilasi terjadi pengikatan karbonil terhadap ligan asil yang akan membentuk 4 rantai karbon. Hal ini disebabkan oleh keelektronegatifan atom karbon lebih tinggi dibanding dengan kobalt. Adapun strukturnya dapat dilihat pada Gambar 7.



**Gambar 7.** Struktur geometri tahap karbonilasi.

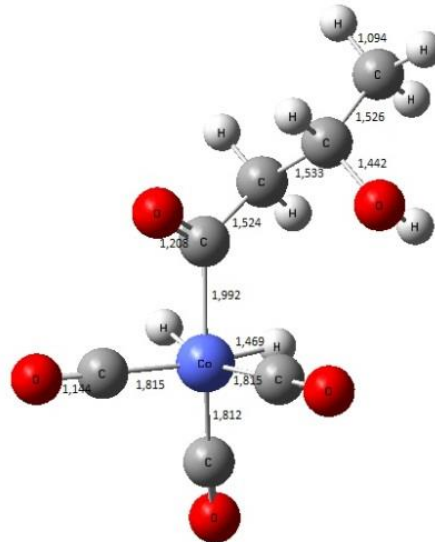
Dari hasil perhitungan Firefly 8.1 struktur karbonilasi menghasilkan jumlah energi sebesar -74,88 kJ/mol. Pada struktur karbonilasi terjadi penataan ulang yaitu dengan adanya adisi CO untuk mengisi kekosongan elektron pada atom kobalt, sehingga struktur karbonilasi akan menjadi lebih stabil, membentuk struktur yang ada pada Gambar 8.



**Gambar 8.** Molekul stabil karbonilasi

### 3.6 Adisi Oksidatif

Pada tahap ini, terjadi adisi hidrogen terhadap produk karbonilasi. Adisi hidrogen ini akan berikatan dengan Co pada posisi ekuatorial membentuk struktur 7 yang dapat dilihat pada Gambar 9.



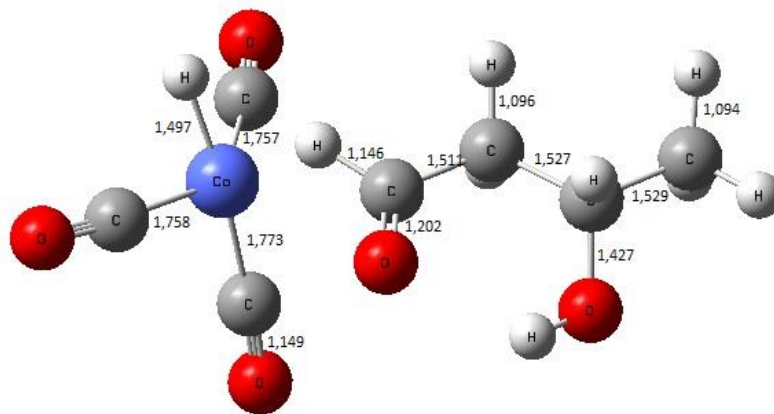
**Gambar 9.** Struktur stabil adisi oksidatif.

Pada struktur diatas terlihat atom Co mengikat 2 atom H. Hal ini dijelaskan menurut Grossman yang menyatakan bahwa  $H_2$  dapat menggunakan 2 elektron pada ikatan  $\sigma$  untuk membentuk ikatan kompleks  $\sigma$  dengan logam. Jika logam minimal mempunyai dua elektron valensi, dapat terjadi back bond menuju orbital  $\sigma^*$  yang akibatnya ikatan H-H melemah, sehingga terbentuk kompleks dihidra H-logam H [26]. Hasil perhitungan Firefly 8.1 menunjukkan energi yang dimiliki oleh produk hasil adisi oksidatif sebesar -22,51 kJ/mol.

### 3.7 Eliminasi Reduktif

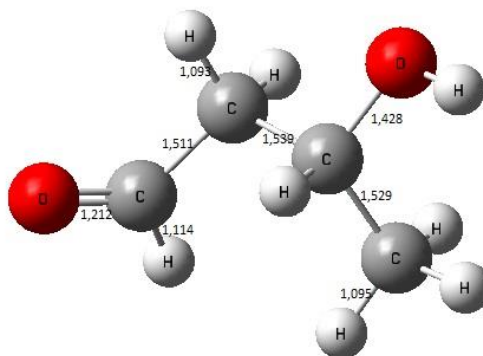
Tahap selanjutnya dari adisi oksidatif yaitu tahap eliminasi, dimana pada tahap ini terjadi reaksi kebalikan dari reaksi adisi, terjadi pelepasan atom atau gugus atom dari sebuah molekul membentuk molekul baru [27]. Untuk membentuk molekul baru berupa produk aldehid rantai cabang yaitu 3-hidroksi butanal diperlukan pemutusan molekul struktur adisi menjadi ikatan C-C dengan adanya regenerasi katalis. Dengan adanya pemutusan logam dengan alkil, satu atom hidrogen akan ditarik menuju C pada alkil untuk memenuhi kestabilan. Sedangkan atom hidrogen lainnya tetap berikatan dengan logam membentuk  $HCo(CO)_3$ . Adapun strukturnya (hasil optimasi geometri) dapat dilihat pada Gambar 10.





**Gambar 10.** Pemutusan substituen dari katalis kobalt membentuk ikatan C-C rantai cabang

Hasil perhitungan Firefly 8.1 menunjukkan energi hasil eliminasi sebesar  $-53,59$  kJ/mol. Dari diagram tingkat energi yang merangkum mekanisme hidroformilasi alil alkohol pada Gambar 11, menunjukkan bahwa reaksi hidroformilasi alil alkohol yang terkatalis  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  dapat memprediksi tahapan ke pembentukan aldehid rantai cabang, dengan hasil perhitungan Firefly 8.1 selisih energi produk 3-hidroksi butanal sebesar  $127,90$  kJ/mol lebih rendah dari pada struktur eliminasi reduktif.



**Gambar 11.** Struktur produk 3-hidroksi butanal

#### 4 Simpulan

Studi komputasi mekanisme reaksi hidroformilasi alil alkohol terkatalisis  $\text{HCo}(\text{CO})_4$  telah berhasil dilakukan. Struktur teroptimasi terdiri dari reaktan, zat antara dan produk hipotesis telah berhasil diperoleh. Beberapa tahap utama dalam mekanisme ini, yaitu penyisipan alil alkohol, koordinasi, penyisipan, karbonilasi, adisi oksidatif, dan eliminasi reduktif telah berhasil dikaji melalui tingkatan energinya.

Mekanisme yang diusulkan meliputi tahapan-tahapan reaksinya telah berhasil dirangkum dalam diagram tingkatan energi elektronik. Dari hasil perhitungan Firefly 8.1 menunjukkan energi untuk pembentukan produk 3-hidroksi butanal sebesar  $-181,49$  kJ/mol. Adapun faktor yang dapat mempengaruhi jalannya mekanisme reaksi adisi dan eliminasi yaitu faktor muatan Mulliken atom karbon. Sebagai perbandingan hasil energi untuk 4-hidroksi butanal sebagai produk utama hidroformilasi alil alkohol terkatalis kompleks kobalt karbonil adalah sebesar  $-170,33$  kJ/mol. Maka dapat disimpulkan sintesis 3-hidroksi butanal dengan katalis kobalt lebih mudah terbentuk dibanding dengan 4-hidroksi butanal.

## Referensi

- [1] Endah M (2009): Pembuatan Minyak Gliserol dari Minyak Kelapa Sawit dengan Proses Hidrolisis, Vol. 59-66.
- [2] Soni Setiadji, dkk (2017): Alternatif Pembuatan Biodiesel Melalui Transesterifikasi Minyak Castor (*Ricinus communis*) Menggunakan Katalis Campuran Cangkang Telur Ayam dan Kaolin, VALENSI Vol. 3, No. 1, pp. 1-10.
- [3] S Setiadji, et al (2018): Synthesis of solid catalyst from egg shell waste and clay for biodiesel production, J. Phys.: Conf. Ser. 1013 012199.
- [4] Ahmad Hidayat, Soni Setiadji, Eko Prabowo Hadisantoso (2018): Sintesis Oksida Grafena Tereduksi (rGO) dari Arang Tempurung Kelapa (*Cocos nucifera*), al-Kimiya, Vol. 5, No. 2 pp. 68-73.
- [5] Ludger K (2002), Allyl Compounds” Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Weinham: Wiley-VCH.
- [6] Rahayu, Nining (2013). Sintesis Biopropanol Dari Gliserol Sebagai Bahan Bakar Alternatif. Universitas Gadjah Mada.
- [7] Cramer, C.J. (2004), Essentials of Computational Chemistry, WILEY
- [8] S Setiadji, et al (2018): Theoretical Investigation of Inclusion Complex between Omeprazole Enantiomers and Carboxymethyl- $\beta$ -Cyclodextrin, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 288 012138.
- [9] S Setiadji, et al (2018): Computational Study of Inclusion Complexes Between Omeprazole Enantiomer with Hydroxypropyl- $\beta$ -Cyclodextrin, J. Phys.: Conf. Ser. 1090 012055.
- [10] CDD Sundari, S Setiadji, et al (2018): Additional Halogen Group (F, Cl, and Br) to 2-Phenyl-imidazole [1,2 $\alpha$ ] pyridine on Corrosion Inhibition Properties: A Computational Study, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 288 012033.
- [11] CDD Sundari, S Setiadji, et al (2018): Ab Initio Study on Electronic Structure of Some Imidazole Derivatives and Its Correlation with Corrosion Inhibition Properties, J. Phys.: Conf. Ser. 1090 012054.
- [12] Soni Setiadji, et al (2015): Studi Komputasi Senyawa Berbasis Anisil Indol dengan Senyawa Akseptor Asam Sianoakrilik sebagai Sensitizer Solar Sel Organik, al Kimiya, Vol. 2, No. 1, pp. 41-45.
- [13] SONI SETIADJI, et al (2019): UJI STABILITAS BAHAN POLYDIMETHYLSILOXANE, JMEI Vol. 09, No. 01, pp. 8 – 17.
- [14] Soni Setiadji, et al (2019): Optimization of Polydimethylsiloxane Synthesized Parameters as Vitreous Humour Substitutes, Materials Science Forum (Volume 966) Pages 189-193.
- [15] Wender H (1953), Evidence for Cobalt Hydrocarbonyl as the Hydroformylation Catalyst. J. Am. Chem., New York.
- [16] Ginawanti Maulida Gunawan, Soni Setiadji, et al (2017): Sintesis Zeolit Silikalit-1 Menggunakan Limbah Tongkol Jagung sebagai Sumber Silika, al-Kimiya, Vol. 4, No. 2, pp. 91-99.
- [17] Soni Setiadji, et al (2017): Pemanfaatan Rumput Gajah sebagai Sumber Silika untuk Sintesis Zeolit T, al-Kimiya, Vol. 4, No. 2, pp. 51-60.
- [18] S Setiadji, et al (2018): Preparation of reduced Graphene Oxide (rGO) assisted by microwave irradiation and hydrothermal for reduction methods, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 434 012079.
- [19] S Setiadji, et al (2018): Synthesis of zeolite ZSM-11 using bamboo leaf as silica source, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 434 012084.

- [20] Houk K. , H. Jabbari, H. Hall and C. Alleman (2008), Why delta-valerolactone polymerizes and gamma-butyrolactone does not, vol. 73, The Journal Organic Chemistry.
- [21] Soni Setiadji, et al (2018): The increased use value of bamboo leaves as silica source for t-type zeolite synthesis, MATEC Web of Conferences 197, 05003.
- [22] S Setiadji, et al (2019): Synthesis of zeolite NaX using elephant grass (pennisetum purpureum) as a silica source and its characterization, J. Phys.: Conf. Ser. 1402 066016.
- [23] Jensen F (1999), Introduction to Computational Chemistry, New York, USA: John Wiley and Sons
- [24] Tsuji J. (2000), Transition Metal Reagents and Catalysts,, vol. 17, Wiley.
- [25] Shriver, D.F. (1940), Inorganic Chemistry., New York: W.H. Freeman And Company
- [26] Grossman R. G. (1964), The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms, Second Edition., Vols. 270-283, Lexington: Springer
- [27] Ojima I. , C. Tsai, M. Tzamarioudaki, and D. Bonafoux (2000), Organic Reaction, vol. 56 : 1.

### Biografi Penulis

Soni Setiadji, M.T., M.Si.



Lahir di Tasikmalaya, 08 September 1977. Meraih dua gelar magisternya di Institut Teknologi Bandung, saat ini sedang melanjutkan studi doktornya di Universitas Padjajaran. Aktif sebagai dosen tetap Jurusan Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Bandung UIN Sunan Gunung Djati Bandung dengan bidang keahlian Kimia Fisik. Beberapa publikasi ilmiah yang pernah dicapai antara lain berjudul : Theoretical Investigation of Inclusion Complex between Omeprazole Enantiomers and Carboxymethyl- $\beta$ -Cyclodextrin; Computational Study of Inclusion Complexes Between Omeprazole Enantiomer with Hydroxypropyl- $\beta$ -Cyclodextrin; Additional Halogen Group (F, Cl, and Br) to 2-Phenyl-imidazole [1,2 $\alpha$ ] pyridine on Corrosion Inhibition Properties: A Computational Study; Ab Initio Study on Electronic Structure of Some Imidazole Derivatives and Its Correlation with Corrosion Inhibition Properties; Studi Komputasi Senyawa Berbasis Anisil Indol dengan Senyawa Akseptor Asam Sianoakrilik sebagai Sensitizer Solar Sel Organik; Alternatif Pembuatan Biodiesel Melalui Transesterifikasi Minyak Castor (*Ricinus communis*) Menggunakan Katalis Campuran Cangkang Telur Ayam dan Kaolin; Synthesis of solid catalyst from egg shell waste and clay for biodiesel production; Sintesis Oksida Grafena Tereduksi (rGO) dari Arang Tempurung Kelapa (*Cocos nucifera*); Sintesis Zeolit Silikalit-1 Menggunakan Limbah Tongkol Jagung sebagai Sumber Silika; Pemanfaatan Rumpuk Gajah sebagai Sumber Silika untuk Sintesis Zeolit T; Uji STABILITAS BAHAN POLYDIMETHYLSILOXANE; Preparation of reduced Graphene Oxide (rGO) assisted by microwave irradiation and hydrothermal for reduction methods; Synthesis of zeolite ZSM-11 using bamboo leaf as silica source; The increased use value of bamboo leaves as silica source for t-type zeolite synthesis; Synthesis of zeolite NaX using elephant grass (*pennisetum purpureum*) as a silica source and its characterization; Optimization of Polydimethylsiloxane Synthesized Parameters as Vitreous Humour Substitutes.

Dr. Nunung Kurniasih, S.Pd., M.Si.



Lahir di Brebes, 27 Maret 1977. Meraih gelar sarjana di Universitas Pendidikan Indonesia pada Tahun 2000 jurusan/bidang studi Pendidikan Kimia, gelar Magister di Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya pada Tahun 2008 Jurusan/bidang studi Kimia Hayati, dan gelar Doktornya di Universitas Padjadjaran pada Tahun 2019 jurusan/ bidang studi Ilmua Kimia. Aktif sebagai dosen tetap di Jurusan Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Gunung Djati Bandung dengan bidang keahlian kimia organik. Beberapa penelitian yang pernah dilakukan antara lain berjudul :Peluang Minyak Atsiri dari Tanaman Kemangi (*Ocimum sanctum* L.) Sebagai Antioksidan; PERBANDINGAN TOKSISITAS ANTARA MINYAK ATSIRI DARI JERUK PERAS (*Citrus sinensis* L obbeck) DAN SEREH DAPUR (*Cymbopogon nardus* L. Rendle) TERHADAP NYAMUK *Aedes aegypti* PENYEBAB DEMAM BERDARAH *DENGUE* (DBD); EFEKTIVITAS DAYA ANTIOKSIDAN EKSTRAK DAUN BINAHONG (*Anredera cordifolia*) DAN DAUN SIRSAK (*Annona muricata* L.) SEBAGAI

ALTERNATIF PENCEGAH PENYAKIT KANKER; EFEKTIVITAS DAYA ANTIOKSIDAN EKSTRAK DAUN BINAHONG DAN DAUN SIRSAK SEBAGAI ALTERNATIF PENCEGAH PENYAKIT KANKER.

Dr. Tina Dewi Rosahdi, S.Pd.,M.Si.



Lahir di Bandung, 02 November 1983. Meraih gelar sarjana di Universitas Pendidikan Indonesia pada Tahun 2005 Jurusan/Bidang Ilmu Pendidikan Kimia, gelar Magister pada Tahun 2008 dan Doktor pada Tahun 2019 di Institut Teknologi Bandung Jurusan/Bidnag Ilmu Biokimia. Aktif sebagai dosen tetap Jurusan Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Gunung Djati Bandung dengan bidang keahlian Biokimia. Bebrapa penelitian yang dilakukan antara lain berjudul : Mutasi d-loop DNA mitokondria pada penderita diabetes melitus tipe 2 komplikasi jantung; Identifikasi spesies isolat bakteri  $K_2Br_5$  dari tanah karst dengan sistem kekerabatan melalui analisis urutan nukleotida gen 16s rRNA; Identifikasi spesies isolat bakteri  $K_2Br_5$  dari tanah karst dengan sistem kekerabatan melalui analisis urutan nukleotida gen 16s rRNA; Pengaruh Penambahan Nitrogen Terhadap Pertumbuhan Dan Kadar Protein Mikroalga *Chlorella vulgaris*; Kandungan Asam Lemak Tak Jenuh dan Asam Lemak Jenuh Ikan Bandeng Presto (*Chanos chanos*); Kandungan Asam Lemak Tak Jenuh dan Asam Lemak Jenuh Ikan Bandeng Presto (*Chanos chanos*); Identifikasi Biopigmen dari Mikroalga Air Tawar (*Ankistrodesmus* sp., *Chlorella* sp., *Spirulina* sp.).

Assyifa Junitasari, S.Pd.,M.Si.



Lahir di Garut, 11 Juni 1991. Meraih gelar sarjana di UIN Sunan Gunung Djati Bandung pada Tahun 2013 Program Studi Pendidikan Kimia, gelar Magister di Institut Teknologi Bandung pada Tahun 2016 Bidang Ilmu Biokimia. Aktif sebagai dosen tetap Jurusan Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Gunung Djati Bandung dengan bidang keahlian Biokimia. Beberapa penelitian yang pernah dilakukan antara lain berjudul : Penerapan Pembelajaran Berbasis Proyek Pada Materi Daur Ulang Minyak Jelantah; Biodiversitas Mikroorganisme pada *Whey* Tahu Lembang, Sumedang, dan Garut Jawa Barat; Analisis Senyawa Aroma pada Tahu Lembang, Sumedang dan Garut Jawa Barat; Effect of Addition of White Turmeric Extract Against Antibacterial Properties in Edible Film Sweet Potato Starch and Whey Protein.