

STUDI MEKANISME REAKSI BROMINASI METIL EUGENOL BERDASARKAN RAGAM EKUIVALEN Br₂ DAN TINJAUAN KOMPUTASINYA

RIFQI AULIA RAMADHAN



**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Studi Mekanisme Reaksi Brominasi Metil Eugenol Berdasarkan Ragam Ekuivalen Br_2 dan Tinjauan Komputasinya” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Mei 2025

Rifqi Aulia Ramadhan
G4401211047

ABSTRAK

RIFQI AULIA RAMADHAN. Studi Mekanisme Reaksi Brominasi Metil Eugenol Berdasarkan Ragam Ekuivalen Br_2 dan Tinjauan Komputasinya. Dibimbing oleh BUDI ARIFIN dan LUTHFAN IRFANA.

Brominasi metil eugenol (4-alil-1,2-dimetoksibenzena, **1**) dengan molekul bromin (Br_2) telah dilaporkan menghasilkan lima produk dalam diklorometana (DCM). Dua produk memiliki rantai samping tertata-ulang dan komposisinya lebih tinggi daripada dua produk lainnya yang tidak tertata-ulang. Juga, dihasilkan produk brominasi aromatik tanpa brominasi alkena. Kedua temuan ini belum pernah dilaporkan. Dengan demikian, diperlukan studi mekanistik terkait tahapan reaksi yang terjadi. Dalam penelitian dilakukan brominasi **1** dalam DCM dengan meragamkan ekuivalen molar Br_2 serta menentukan fraksi konformer produk dibromida terstabil secara komputasi. Brominasi dengan 0,4–2,6 ekuiv Br_2 diduga melalui empat tahapan dengan produk dibromida tertata-ulang lebih banyak terbentuk di tahap awal, sedangkan campuran ~1:1 antara kedua tribromida dihasilkan di akhir. Konformer *anti-gauche* mendominasi konformasi kedua produk dibromida dan (*R*) merupakan konfigurasi mutlak dibromida **2** berdasarkan perbandingan sinyal spektrum resonans magnet inti proton hasil komputasi dengan eksperimen. Studi mekanistik akan dilanjutkan dengan brominasi produk murni dan perhitungan keadaan transisi secara komputasi.

Kata kunci: bromin, konformer, mekanisme, metil eugenol, tertata-ulang

ABSTRACT

RIFQI AULIA RAMADHAN. Mechanistic Study of Methyl Eugenol Bromination Based on Various Br_2 Equivalents and Computational Perspective. Supervised by BUDI ARIFIN and LUTHFAN IRFANA.

Bromination of methyl eugenol (4-allyl-1,2-dimethoxybenzene, **1**) using molecular bromine (Br_2) has been reported to produce five products in dichloromethane (DCM). The two products had rearranged side chains, and their compositions were higher than those of the other two non-rearranged products. Aromatic brominated products are produced without alkene bromination and have never been reported.. Therefore, mechanistic study of the reaction steps is required. This study carried out bromination of **1** in DCM by varying the molar equivalent of Br_2 and computationally determined the fraction of the most stable dibromide product conformers. Bromination with 0.4–2.6 equiv of Br_2 is thought to occur in four steps with the rearranged dibromide product being formed more at the beginning, while a ~1:1 mixture of the two tribromides is produced at the end. The *anti-gauche* conformer dominates the conformation of both dibromide products, and (*R*) is the absolute configuration of dibromide **2** based on a comparison of the computed and experimental signals of the proton nuclear magnetic resonance. The mechanistic study would be continued using the bromination of pure products and computational calculations of the transition state.

Keywords: bromine, conformer, mechanism, methyl eugenol, rearrangement

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2025¹
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.

STUDI MEKANISME REAKSI BROMINASI METIL EUGENOL BERDASARKAN RAGAM EKUIVALEN Br₂ DAN TINJAUAN KOMPUTASINYA

RIFQI AULIA RAMADHAN

Skripsi

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Kimia

**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

- 1 Dr. Deden Saprudin, S.Si., M.Si.
- 2 Dr. Tetty Kemala, S.Si., M.Si.
- 3 Dr. Drs. Komar Sutriah, M.Si.

Judul Skripsi: Studi Mekanisme Reaksi Brominasi Metil Eugenol Berdasarkan Ragam Ekuivalen Br₂ dan Tinjauan Komputasinya

Nama : Rifqi Aulia Ramadhan
NIM : G4401211047

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Budi Arifin, S.Si, M.Si.



Pembimbing 2:
Luthfan Irfana, S.Si., M.Si.



Diketahui oleh

Ketua Departemen Kimia:
Prof. Dr. Dra. Dyah Iswantini Pradono, M.Sc.Agr
NIP 196707301991032001




Tanggal Ujian: 7 Mei 2025

Tanggal Lulus:



- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah *subhanaahu wa ta'ala* atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Desember 2024 sampai bulan April 2025 ini ialah mekanisme reaksi kimia organik, dengan judul “Studi Mekanisme Reaksi Brominasi Metil Eugenol Berdasarkan Ragam Ekuivalen Br₂ dan Tinjauan Komputasinya”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada Dr. Budi Arifin, S.Si., M.Si. selaku pembimbing pertama dan Luthfan Irfana, S.Si., M.Si. selaku pembimbing kedua atas bimbingan, dukungan, saran, dan masukan pada penelitian dan penulisan karya ilmiah ini. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada Kurniawanti, M.Si., Verucha Fauzia Putri, M.Si., Fahrudin, S.Si., Fera, Amalia, dan Guntur yang telah membantu penulis selama pengumpulan data penelitian. Ungkapan terima kasih juga penulis ucapkan kepada Laboratorium Terpadu IPB dan Kak Ishlah yang juga telah membantu penulis dalam pengumpulan data. Terima kasih disampaikan kepada Ibunda, kakak, adik, serta seluruh keluarga yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya. Terima kasih juga penulis ucapkan kepada seseorang yang telah menemani penulis dalam penyusunan skripsi ini. Terima kasih kepada seluruh teman-teman yang tidak bisa penulis sebutkan yang telah memberikan dukungan sehingga penulis mampu menyelesaikan karya ilmiah ini dengan baik.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan..

Bogor, Mei 2025

Rifqi Aulia Ramadhan



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :

- a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perpustakaan IPB University



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	3
II METODE	4
2.1 Waktu dan Tempat	4
2.2 Alat dan Bahan	4
2.3 Prosedur Kerja	4
2.3.1 Brominasi Metil Eugenol dengan Ragam Ekuivalen Br ₂	4
2.3.2 Analisis GC-MS Produk Brominasi	4
2.3.3 Analisis Termodinamika Produk Brominasi	5
2.3.4 Prediksi Ansambel Konformer Produk Brominasi Secara Komputasi	6
III HASIL DAN PEMBAHASAN	7
3.1 Produk Brominasi Metil Eugenol dengan Ragam Ekuivalen Br ₂	7
3.2 Usulan Mekanisme Reaksi Brominasi Metil Eugenol	8
3.3 Dugaan Konformasi Produk Brominasi Metil Eugenol	11
IV SIMPULAN DAN SARAN	16
4.1 Simpulan	16
4.2 Saran	16
DAFTAR PUSTAKA	17
LAMPIRAN	19
RIWAYAT HIDUP	30



DAFTAR TABEL

3.1	Nilai R_f produk brominasi	7
3.2	Analisis sinyal spektrum ^1H NMR senyawa 2	13
3.3	Analisis sinyal spektrum ^1H NMR senyawa 3	15

DAFTAR GAMBAR

3.1	Produk brominasi metil eugenol 1 dalam pelarut DCM	1
3.1	Rendemen relatif produk terhadap ekuivalen Br_2	8
3.2	Usulan mekanisme adisi elektrofilik Br_2 pada 1	9
3.3	Usulan mekanisme substitusi elektrofilik aromatik pada 1	9
3.4	Usulan mekanisme substitusi elektrofilik aromatik dan adisi elektrofilik pada brominasi lebih lanjut monobromida dan dibromida	10
3.5	Diagram energi struktur produk brominasi 1	11
3.6	Dugaan konformer paling dominan pada isomer <i>R</i> - (A) dan <i>S</i> -dibromida 2 (B). Proyeksi Newman konfigurasi (A) di sepanjang ikatan C-1' ke C-2' (C) dan C-2' ke C-3' (D). Proyeksi Newman konfigurasi (B) di sepanjang ikatan C-1' ke C-2' (E) dan C-2' ke C-3' (F)	12
3.7	Konformer paling dominan pada dibromida 3 beserta proyeksi Newman-nya ditinjau dari ikatan C1'-C2' (A) dan C1'-C3' (B)	14
3.8	Analisis pola pembelahan multiplet H-1' pada senyawa 3	15

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram alir metode pendugaan fraksi konformer secara komputasi	20
2	Profil KLT hasil brominasi pada setiap ekuivalen Br_2	21
3	Komposisi produk berdasarkan rendemen relatif hasil GC-MS	25
4	Ansambel konformer senyawa 2	26
5	Perbandingan spektrum ^1H NMR senyawa <i>R</i> - 2 dan <i>S</i> - 2	28
6	Ansambel konformer senyawa 3	29
7	Perbandingan spektrum ^1H NMR senyawa 3	29