

# **STUDI MOLEKULAR MEKANISME REAKSI $\alpha$ - *PINENE* MENJADI TERPINEOL DAN TURUNANNYA**

## **Laporan Penelitian**

Disusun untuk memenuhi tugas akhir guna mencapai  
gelar sarjana di bidang Ilmu Teknik Kimia

Oleh:

**Yonas Mulyadi (2014620008)**

**Jessica Suryajaya (2014620010)**

Pembimbing:

**Dr. Antonius Indarto**

**Yansen Hartanto, S.T., M.T.**



**JURUSAN TEKNIK KIMIA  
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI  
UNIVERSITAS KATOLIK PARAHYANGAN  
BANDUNG**

**2018**

## LEMBAR PENGESAHAN



**JUDUL: STUDI MOLEKULAR MEKANISME REAKSI  $\alpha$ - PINENE  
MENJADI TERPINEOL DAN TURUNANNYA**

Catatan

Telah diperiksa dan disetujui,  
Bandung, Januari 2018

Pembimbing 1

Dr. Antonius Indarto

Pembimbing 2

Yansen Hartanto, S.T., M.T.



JURUSAN TEKNIK KIMIA  
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI  
UNIVERSITAS KATOLIK PARAHYANGAN



## SURAT PERNYATAAN

Kami yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Yonas Mulyadi

NPM : 2014620008

Nama : Jessica Suryajaya

NPM : 2014620010

Dengan ini menyatakan bahwa laporan penelitian dengan judul:

**“STUDI MOLEKULAR MEKANISME REAKSI  $\alpha$ - PINENE MENJADI TERPINEOL DAN TURUNANNYA”**

Adalah hasil pekerjaan kami dan seluruh ide, pendapat atau materi dari sumber lain telah dikutip dengan cara penulisan referensi yang sesuai.

Pernyataan ini kami buat dengan sebenar-benarnya dan jika pernyataan ini tidak sesuai dengan kenyataan, maka saya bersedia menanggung sanksi sesuai dengan peraturan yang berlaku.

Bandung, Januari 2018

Yonas Mulyadi  
(2014620008)

Jessica Suryajaya  
(2014620010)

# LEMBAR REVISI



**JUDUL: STUDI MOLEKULAR MEKANISME REAKSI  $\alpha$ - PINENE  
MENJADI TERPINEOL DAN TURUNANNYA**

Catatan

Telah diperiksa dan disetujui oleh :

Bandung, Januari 2018

Penguji

I Gede Pandega Wiratama, S.T., M.T.

Penguji

Kevin Cleary Wanta, S.T., M.Eng.

## KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas berkat dan rahmat-Nya penulis dapat menyelesaikan laporan penelitian dengan judul “Studi Molekular Mengenai Mekanisme Reaksi  $\alpha$ -Pinene Menjadi Terpeneol dan Turunannya” tepat pada waktunya. Laporan penelitian ini disusun untuk memenuhi kriteria kelulusan mata kuliah ICE-410 yaitu “Penelitian”.

Seiring proses penulisan laporan penelitian ini, penulis mendapatkan berbagai dukungan dan saran dari berbagai pihak. Dukungan yang diberikan dapat berwujud material maupun non-material. Saran yang diberikan juga sangat membantu penulis dalam menyelesaikan laporan penelitian ini. Oleh karena itu, penulis juga secara khusus ingin menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dr. Antonius Indarto selaku dosen pembimbing utama yang sudah berjasa untuk membimbing dan mengarahkan penulis dalam penyusunan proposal ini
2. Yansen Hartanto S.T., M.T. selaku dosen pembimbing yang sudah berjasa memberikan masukan dan saran agar proposal ini menjadi lebih baik
3. Orang tua serta keluarga penulis yang telah memberikan dukungan dan kekuatan selama penyusunan proposal ini berlangsung
4. Jonathan dan Mellisa dari jurusan Teknik Kimia ITB yang sudah memberikan saran
5. Teman-teman jurusan Teknik Kimia Universitas Katolik Parahyangan angkatan 2014 yang sudah memberikan semangat dan saran
6. Pihak-pihak lain yang sudah membantu secara langsung dan tidak langsung, yang tidak dapat disebutkan satu persatu

Penulis menyadari bahwa masih banyak kekurangan di dalam penyusunan laporan penelitian ini. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran dari pembaca untuk dapat menyempurnakan laporan penelitian ini. Akhir kata, penulis berharap laporan penelitian ini dapat diterima dan bermanfaat bagi para pembaca.

Bandung, Januari 2018

Penulis

# DAFTAR ISI

<b>JUDUL</b> .....	i
<b>LEMBAR PENGESAHAN</b> .....	ii
<b>SURAT PERNYATAAN</b> .....	iii
<b>LEMBAR REVISI</b> .....	iv
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	v
<b>DAFTAR ISI</b> .....	vi
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	ix
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	x
<b>INTISARI</b> .....	xi
<b>ABSTRACT</b> .....	xii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	1
1.1 Latar belakang.....	1
1.2 Sentral Masalah.....	2
1.3 Identifikasi Masalah.....	2
1.4 Premis .....	2
1.5 Hipotesis .....	4
1.6 Tujuan Penelitian .....	4
1.7 Manfaat Penelitian .....	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	5
2.1 Terpentin .....	5
2.2 Terpeneol.....	8
2.3 Reaksi Hidrasi Alkena .....	9
2.4 Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi Terpeneol .....	9

2.4.1 Metode dengan Dua Tahap Reaksi.....	10
2.4.2 Metode dengan Satu Tahap Reaksi .....	11
2.5 Pengaruh Temperatur Reaksi dan Jenis Asam Organik terhadap Perolehan Terpeneol .....	11
2.6 <i>Gas Chromatography – Mass Spectrometry (GC-MS)</i> .....	12
2.7 Pemodelan Terhadap Struktur Molekul .....	14
2.7.1. Elektron Valensi .....	14
2.7.2 Eksitasi Elektron .....	16
2.7.3 Pengenalan Tentang Gaya Interaksi Antar Molekul .....	16
2.7.4 Interaksi dipol-dipol .....	18
2.7.5 Interaksi dipol terinduksi.....	18
2.7.6 Energi Dispersi .....	19
2.7.7 Kontribusi Energi Repulsif.....	20
2.7.8 Energi Bebas <i>Gibbs</i> .....	20
2.7.9 Energi Batas <i>Gibbs (Gibbs Barrier Energy)</i> .....	21
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b> .....	22
3.1. Bahan - Bahan Penelitian.....	22
3.2. Peralatan - Peralatan Penelitian .....	22
3.3. Metode Penelitian .....	22
3.3.1 Tahap eksperimental .....	23
3.3.2 Tahapan Pemodelan .....	26
3.4 Analisis dan Pengolahan Data .....	30
3.4.1 Analisis dengan GC-MS .....	30
3.4.2 Perhitungan Data Termodinamika .....	30
3.5 Lokasi dan Jadwal Kerja Penelitian.....	31

<b>BAB IV PEMBAHASAN</b> .....	32
4.1 Hasil Tahap Eksperimental.....	32
4.2 Hasil Tahap Pemodelan Molekular.....	33
4.2.1 Mekanisme Pembentukan Karbokation pada Peta Mekanisme Reaksi $\alpha$ -pinene	36
4.2.2 Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Pembentukan Terpeneol.....	38
4.2.3 Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi Produk Samping.....	41
 <b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b> .....	47
5.1 Kesimpulan .....	47
5.2 Saran .....	47
 <b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	48
 <b>LAMPIRAN A HASIL ANTARA PEMODELAN MOLEKULAR</b> .....	52
A.1 Data Termodinamika Hasil Optimasi <i>Gaussian09.d</i> .....	52
A.2 Pengolahan Data Peta Mekanisme .....	53
 <b>LAMPIRAN B CONTOH PERHITUNGAN</b> .....	56
B.1 Perhitungan Data Termodinamika Standar <i>Reference 298.5°k</i> .....	56
B.2 Perhitungan Data Konstanta Laju Reaksi .....	56
 <b>LAMPIRAN C MATERIAL SAFETY DATA SHEET</b> .....	58
C.1 Terpentin (W.M.Barr) .....	58
C.2 PTSA (Sparchem) .....	60



## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar II.1</b> Komponen dalam Terpentin dan Turunan Produk dari Terpentin.....	6
<b>Gambar II.2</b> Komponen Monoterpen Umum yang Ada pada Terpentin .....	6
<b>Gambar II.3</b> Mekanisme Reaksi Hidrasi $\alpha$ -pinene .....	9
<b>Gambar II.4</b> Reaksi Pembentukan Terpin Hidrat .....	11
<b>Gambar II.5</b> Diagram Sistem GC-MS yang Umum .....	13
<b>Gambar II.6</b> <i>Gas Chromatograph</i> dan <i>Quadrupole Mass Spectrometer</i> .....	13
<b>Gambar II.7</b> Representasi Ikatan Molekul.....	15
<b>Gambar II.8</b> Gambaran Interaksi Antara Dua Molekul.....	17
<b>Gambar II.9</b> Skema Interaksi Dipol-Terinduksi .....	18
<b>Gambar III.1</b> Diagram Alir Tahap Eksperimental Pembuatan Terpeneol dari Terpentin .	23
<b>Gambar III.2</b> Diagram Alir Proses Tahapan Agitasi.....	24
<b>Gambar III.3</b> Skema Alat yang Digunakan untuk Tahap Agitasi .....	25
<b>Gambar III.4</b> Diagram Alir Proses Tahapan Pemisahan Dua Fasa .....	25
<b>Gambar III.5</b> Skema Alat yang Digunakan pada Tahap Pemisahan Dua Fasa .....	26
<b>Gambar III.6</b> Diagram Alir Tahap Pemodelan Molekular .....	27
<b>Gambar III.7</b> Tampilan User Interface beserta Contoh Pemodelan Input <i>Gaussview05</i> ..	28
<b>Gambar III.8</b> Tahapan Pemodelan secara Umum .....	29
<b>Gambar III.9</b> Bagan Proses Analisis Sampel Produk dengan Menggunakan GC-MS.....	30
<b>Gambar IV.1</b> Hasil Reaksi Terpentin dengan Air pada Berbagai Temperatur .....	32
<b>Gambar IV.2</b> Hasil Reaksi Terpentin dengan Campuran Air dan PTSA pada Temperatur 85°C.....	33
<b>Gambar IV.3</b> Hasil Analisis GC-MS pada Hasil Percobaan Terpentin dengan Campuran Air dan PTSA pada Temperatur 85°C.....	34
<b>Gambar IV.4</b> Peta Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene .....	35
<b>Gambar IV.5</b> Skema Pemodelan <i>Pinanyl Carbocation</i> .....	36
<b>Gambar IV.6</b> Mekanisme Jalur Karbokation yang Diajukan Liu,dkk (2007) .....	38
<b>Gambar IV.7</b> Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi Grup <i>Terpineol</i> .....	40
<b>Gambar IV.8</b> Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi Grup <i>Cineol</i> .....	42
<b>Gambar IV.9</b> Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi <i>Limonene</i> dan <i>Terpinolene</i> ....	43
<b>Gambar IV.10</b> Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi Grup <i>Terpinene</i> .....	45
<b>Gambar IV.11</b> Jalur Mekanisme Reaksi $\alpha$ -Pinene Menjadi <i>Borneol</i> dan <i>Fenchol</i> .....	46

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel II.1</b> Sifat Kimia Terpentin .....	5
<b>Tabel II.2</b> Kegunaan dari Terpentin dan Turunannya .....	7
<b>Tabel II.3</b> Sifat-sifat Senyawa Terpeneol .....	8
<b>Tabel III.1</b> Jadwal Kerja Penelitian.....	31
<b>Tabel IV.1</b> Keterangan Hasil Analisis GC-MS pada Hasil Percobaan Terpentin dengan Campuran Air dan PTSA pada Temperatur 85°C .....	34
<b>Tabel IV.2</b> Data Termodinamika Hasil Pemodelan Molekular Karbokation: <i>P-Menthenyl</i> , <i>Isobornyl</i> , dan <i>Fenchyl</i> .....	37
<b>Tabel IV.3</b> Data Termodinamika Grup Terpeneol .....	40
<b>Tabel IV.4</b> Data Termodinamika Grup <i>Cineol</i> .....	42
<b>Tabel IV.5</b> Data Termodinamika <i>Limonene</i> dan <i>Terpinolene</i> .....	42
<b>Tabel IV.6</b> Data Termodinamika <i>P-menthenyl Carbocation</i> dan <i>Terpinene Carbocation</i>	44
<b>Tabel IV.7</b> Data Termodinamika Grup <i>Terpinene</i> .....	44
<b>Tabel IV.8.</b> Data Termodinamika <i>Borneol</i> dan <i>Fenchol</i> .....	46

## INTISARI

Terpineol adalah komponen yang memiliki nilai berharga bagi berbagai industri seperti pewangi dalam industri kosmetik, agen anti fungal dalam industri farmasi dan desinfektan. Terpineol diproduksi dari  *$\alpha$ -pinene* yang merupakan komponen utama terpenin dengan metode yang melibatkan perlakuan  *$\alpha$ -pinene* dengan menggunakan mineral dan asam organik, baik digunakan secara bersama-sama ataupun terpisah. Terpineol di Indonesia diproduksi oleh *Perhutani Pine Chemical Industry* di Pemalang, Indonesia.

Sintesis terpineol dari terpenin pada dasarnya merupakan reaksi hidrasi alkena. Reaksi hidrasi  *$\alpha$ -pinene* pada umumnya menggunakan katalis asam dimana reaksi hidrasi ini bersaing dengan reaksi isomerisasi  *$\alpha$ -pinene* sehingga menghasilkan hasil produk berupa campuran kompleks monoterpen, alkohol, dan hidrokarbon. Akibat dari tingginya varietas produk yang dihasilkan, karakteristik dan kecenderungan hasil produk dari sintesis terpineol ini menjadi sulit untuk ditentukan. Tujuan dari penelitian ini adalah menentukan jalur reaksi hidrasi  *$\alpha$ -pinene* untuk mengetahui karakteristik dan kecenderungan hasil produk dari sintesis terpineol. Secara garis besar, tahapan dalam metode penelitian ini dibagi menjadi dua, yaitu tahap eksperimental untuk mendapatkan hasil produk dan tahap pemodelan molekular untuk mendapatkan mekanisme jalur reaksi. Variabel yang divariasikan dalam tahap ekperimental adalah temperatur reaksi. Temperatur reaksi akan divariasikan antara 35-85°C. Reaksi hidrasi  *$\alpha$ -pinene* dilangsungkan dengan menggunakan air tanpa katalis dan air dengan katalis. Hasil dari metode ekperimental akan dianalisa menggunakan GC-MS untuk mengetahui perolehan terpineol dan komponen produk samping lainnya. Tahap pemodelan bertujuan untuk memodelkan peta mekanisme reaksi atau “insight” dari jalur reaksi  *$\alpha$ -pinene*. Tahap pemodelan dilakukan pada struktur stabil dan transisi. Dari tahap pemodelan akan diperoleh hasil akhir berupa struktur optimasi serta data-data termodinamika. Data ini dibutuhkan untuk membuat peta mekanisme reaksi.

Dari hasil tahap eksperimental dan pemodelan molekular, reaksi  *$\alpha$ -pinene* terjadi melalui suatu molekul intermediet yaitu karbokation. Reaksi  *$\alpha$ -pinene* yang terjadi berupa reaksi hidrasi dan reaksi isomerisasi. Hasil pemodelan molekular menunjukkan bahwa karbokation *p-mentenyl* lebih sulit terbentuk sehingga terpineol yang berasal dari karbokation *p-mentenyl* juga lebih sulit terbentuk.

**Kata kunci** :  *$\alpha$ -pinene*, isomerisasi, hidrasi, ekperimental, pemodelan molekular

## ABSTRACT

*Terpineol is a highly valuable component used for many industries such as cosmetics, pharmaceutical industries and disinfectants. Terpineol is produced from  $\alpha$ -pinene which is an essential component from turpentine. Terpineol is generally obtained through the reaction of  $\alpha$ -pinene by using either minerals or organic acids. Recently, terpineol in Indonesia is produced by Perhutani Pine Chemical Industry in Pematang, Indonesia.*

*The terpineol synthesis of turpentine involves a series of reactions, such as hydration and isomerization. The  $\alpha$ -pinene reaction generally occurs in a presence of a homogeneous acid catalyst, which the hydration is in competition with the isomerization reaction. As a result, a complex mixture consists of monoterpenes and alcohols is produced throughout the process. Because of the tendencies of wide product varieties, the characteristics and trends of yield from this reaction becomes difficult to determine. The purpose of this research is to determine the reaction path of  $\alpha$ -pinene reaction as well as to know the characteristics and the tendencies of product formed from the reaction. Based on the purpose that have been stated, The stages in this research method are then divided into two stages. The first is the experimental stage, served as a pre-experiment to obtain the results for the molecular modelling's basis. On the other side, molecular modeling is conducted in order to obtain a detailed form of the reaction path. The variable that is varied in the experimental stage is the reaction temperature. The reaction of  $\alpha$ -pinene is mainly involves endothermic and some exothermic reactions, thus the reaction temperature will be varied between 35-85 ° C. The  $\alpha$ -pinene reaction will be carried out by using water and acid catalyst as a validation. The results of the experimental method will be analyzed using GC-MS to determine the acquisition of terpineol and other by-products. The molecular modelling is conducted in stable and transition phase by using the gaussian09.d01 with a relatively custom method called m062X. The "insight" of the  $\alpha$ -pinene reaction mechanism will be simulated and shown perfectly by this method.*

*From the experimental stage, it is shown that  $\alpha$ -pinene reaction will occur by passing an intermediate molecule called carbocation. The isomerization and hydration occurs after the unstable carbocation undergoes a few rearrangement. The molecular modelling later proves this fact by conducting a thermodynamic calculation. Furthermore, from the modelling stage, it can be shown that p-methenyl carbocation is rather hard to be produced. Therefore the by-products obtained from other carbocations will be the easier one to obtain.*

**Keyword:**  *$\alpha$ -pinene, isomerization, hydration, experimental, molecular modelling*

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar belakang

Indonesia merupakan negara yang memiliki kekayaan hayati yang besar. Namun, kekayaan alam tersebut belum dimanfaatkan dengan maksimal. Salah satu kekayaan Indonesia yang dapat dimanfaatkan adalah pohon pinus. Pohon pinus banyak dibudidayakan di berbagai bagian Indonesia, dengan populasi terbanyak di Pulau Jawa serta sebagian berada di Sulawesi Selatan dan Sumatera Barat (Sukarno, Hardiyanto, Marsoem, & Na'iem, 2015). Luas lahan hutan pinus di Indonesia diperkirakan sekitar 300.000 hektar dengan kapasitas produksi lebih dari 500.000 ton/tahun untuk getah pohon pinus (Wiyono, Tachibana, & Tinambunan, 2006). Getah pohon pinus dapat diolah menjadi terpenin yang dapat digunakan sebagai pelarut cat dan pernis. Terpenin dapat diolah lebih lanjut menjadi terpineol, senyawa yang memiliki banyak manfaat dalam dunia industri seperti industri parfum, farmasi, dan industri desinfektan. Sampai saat ini, terpineol di Indonesia diproduksi oleh *Perhutani Pine Chemical Industry* di Pemalang, Indonesia.

Reaksi sintesis terpineol pada dasarnya merupakan reaksi hidrasi alkena. Hidrasi  $\alpha$ -pinene pada umumnya dilangsungkan dengan menggunakan katalis asam homogen dan akan menghasilkan produk isomerisasi dan hidrasi seperti campuran kompleks dari monoterpen, alkohol, dan hidrokarbon. Produk utama dari hasil hidrasi  $\alpha$ -pinene adalah  $\alpha$ -terpineol, cineol, borneol, dan fenchol, sedangkan produk hasil isomerisasi yang juga terbentuk adalah golongan terpinene, limonene dan turunan lain dari terpineol serta terpin hidrat jika terjadi hidrasi berlebih (Monteiro & Veloso, 2004). Campuran yang kompleks ini disebabkan oleh beberapa faktor yaitu sifat reaksi hidrasi cenderung bersifat reversibel, dan kompetisi antara reaksi hidrasi dan isomerisasi cukup tinggi dimana hal ini dipengaruhi oleh kondisi eksperimental seperti waktu reaksi, temperatur, jenis katalis, dan rasio antara reaktan dan katalis yang dipakai.

Akibat dari sangat beragamnya varietas produk yang dihasilkan, karakteristik dan kecenderungan hasil produk dari sintesis terpineol ini menjadi sulit untuk ditentukan. Untuk mengetahui karakteristik dan kecenderungan hasil produk dari sintesis terpineol ini, perlu diadakan sebuah studi teoritis untuk mengetahui jalur reaksi hidrasi  $\alpha$ -pinene. Diharapkan

dengan adanya “*insight*” yang dibuat ini, mekanisme hidrasi  $\alpha$ -pinene dapat diketahui secara gamblang.

## 1.2 Sentral Masalah

Terpentin ketika direaksikan dengan air, akan mengalami berbagai macam jenis reaksi, menghasilkan produk berupa campuran kompleks yang terdiri dari alkohol, monoterpen, dan hidrokarbon. Pada umumnya, reaksi  $\alpha$ -pinene (komponen utama dalam terpentin) berupa reaksi hidrasi dan membentuk senyawa terpineol. Namun, reaksi hidrasi  $\alpha$ -pinene ini juga turut bersaing dengan reaksi isomerisasi. Reaksi isomerisasi ini biasanya menghasilkan limonen dan produk isomerisasi lainnya. Hal ini menyebabkan produk hasil sintesis terpentin menjadi kompleks dan sulit untuk ditebak. Untuk itu, perlu diketahui kecenderungan dan karakteristik dari proses ini dengan melakukan studi terhadap peta mekanisme reaksi hidrasi  $\alpha$ -pinene.

## 1.3 Identifikasi Masalah

Sehubungan dengan sentral masalah di atas adapun identifikasi masalahnya adalah bagaimana bentuk peta mekanisme jalur reaksi yang terjadi pada reaksi kompleks terpentin.

## 1.4 Premis

Melalui hasil studi literatur dari beberapa penelitian terdahulu yang terkait, dapat ditarik beberapa premis sebagai berikut.

1. Sheffield (1936) pada percobaan yang menggunakan asam fosfat dan asam format menyatakan temperatur reaksi yang optimal adalah 35°C, tidak melebihi 50°C.
2. Sheffield (1936) melakukan percobaan dengan 2000 gram terpentin yang mengandung 20% dipenten dan campuran asam berupa 1000 gram asam format 70% dan 300 gram asam fosfat 70% dengan waktu agitasi 8 jam dan temperatur dibawah 45°C didapatkan hasil 1180 gram terpineol (55%-b bahan baku), sedangkan pada percobaan dengan 2000 gram  $\alpha$ -pinene dan campuran asam berupa 1200 gram asam fosfat 70% dan 400 gram asam fosfat 70% dengan waktu agitasi 8 jam dan temperatur dibawah 45°C didapatkan hasil 1400 gram terpineol (70%-b bahan baku).
3. Sheffield (1939) melakukan penelitiannya menggunakan asam poliprotik non-karboksilat dan turunan monoaril atau monoalkil serta pelarut organik inert dengan waktu reaksi 2 – 6 jam.

4. Sheffield (1939) memperoleh hasil percobaan dengan menggunakan 1000 satuan massa terpenin dan campuran asam-pelarut berupa 800 satuan massa asam sulfat 32% dan 500 satuan massa aseton dengan waktu agitasi 9 jam dan temperatur 40-45°C serta dengan menggunakan 2000 satuan massa *α-pinene* dan campuran asam-pelarut berupa 1080 satuan massa asam sulfat 39% dan 420 satuan massa aseton dengan waktu agitasi 6 jam dan temperatur 35-40°C didapatkan hasil berturut-turut yaitu 623 satuan massa terpineol (62,3%-b bahan baku) dan 862 satuan massa terpineol dan 176 satuan massa pembentukan terpin hidrat.
5. Herrlinger (1959) pada percobaan yang menggunakan asam sulfat dan pelarut organik inert menyatakan temperatur reaksi yang optimal adalah pada rentang 25°C-35°C.
6. Menurut Herrlinger (1959), percobaan menggunakan asam sulfat dan pelarut organik inert membutuhkan waktu reaksi minimal 8 jam, paling baik adalah 12 jam.
7. Roman-Aguirre, dkk.(2005) menyatakan asam kloroasetat merupakan katalis yang baik untuk mendapatkan terpineol dari pinen dimana Roman-Aguirre mendapatkan konversi tertinggi sebesar 99% dengan selektivitas 70% setelah 4 jam reaksi pada temperatur 70°C.
8. Utami, dkk. (2011) melakukan percobaan dengan 0,25 mol *α-pinene* dan campuran 0,6 mol aquadest (rasio mol aquadest terhadap *α-pinene* 2.4/1) dan katalis asam kloroasetat dengan konsentrasi 6 mol/L dengan mevariasikan temperatur reaksi pada 60°C, 70°C, 80°C, dan 90°C mendapatkan hasil percobaan dimana pada temperatur 60°C dan 70°C konversi *α-pinen* terus meningkat sepanjang waktu reaksi sedangkan pada temperatur 80°C dan 90°C konversi *α-pinene* turun pada waktu reaksi berturut-turut 240 menit dan 180 menit.
9. Hasil percobaan yang dilakukan Utami, dkk. (2011) yang memberikan konversi *α-pinene* terbesar yaitu sekitar 50-60% terdapat pada temperatur operasi 80°C dengan waktu reaksi 240 menit.
10. Prakoso, dkk (2017) melakukan percobaan sintesis terpineol dari *α-pinene* dengan menggunakan katalis asam dengan harga terjangkau dimana *paratoluenesulfonic-acid* (PTSA) merupakan katalis asam yang memberikan hasil terpineol yang baik.
11. Menurut Holguin (2008), karbokation pada *α-pinene* terbentuk pada ikatan rangkap dua, dimana rantai karbon rangkap dua yang memiliki atom hydrogen berlebih akan mengalami gangguan elektrofilik.

12. Menurut Ebmeyer (2001), karbokation *iso-bornyl* lebih stabil dibandingkan karbokation pinanil, dengan beda energi sebesar 8.8 kcal/mol
13. Menurut Liu,dkk , mekanisme reaksi pada hidrasi  $\alpha$ -pinen melibatkan pembentukan grup limonen, serta pembentukan grup terpineol , borneol dan *fenchol*.

### 1.5 Hipotesis

Berdasarkan premis – premis sebelumnya dan melalui hasil studi literatur, dapat ditarik beberapa hipotesis sebagai berikut.

1. Peningkatan temperatur reaksi meningkatkan perolehan terpineol namun juga memperbesar perolehan produk samping sehingga selektivitas terhadap terpineol berkurang.
2. Temperatur reaksi yang memberikan hasil perolehan terpineol dari terpentin yang bagus adalah sekitar 45-60°C. Oleh karena itu, dilakukan percobaan dalam rentang tersebut, dengan menambahkan sedikit tambahan rentang untuk memperakurat eksperimen.
3. Mekanisme sintesa terpineol dari terpentin melalui tahapan karbokation, dan untuk pemodelan ini digunakan beberapa jenis karbokation dalam prosesnya.

### 1.6 Tujuan Penelitian

Berdasarkan sentral masalah dan identifikasi masalah di atas tujuan penelitian ini dilakukan untuk mengetahui peta mekanisme reaksi  $\alpha$ -pinene sehingga diketahui karakteristik reaksi antara hidrasi dan isomerisasi dari reaksi  $\alpha$ -pinene sehingga diharapkan perolehan terpineol yang telah didapatkan dari terpentin dapat ditingkatkan.

### 1.7 Manfaat Penelitian

1. Bagi dunia industri diharapkan efisiensi dan produktivitas dalam produksi terpineol dapat meningkat.
2. Bagi peneliti diharapkan dapat menambah kasanah ilmu pengetahuan dan teknologi mengenai mekanisme reaksi sintesis terpineol dari terpentin sehingga dapat diantisipasi terlebih dahulu sesuai dengan tujuan eksperimen masing-masing.