

**KAJIAN TEORITIS MEKANISME REAKSI DEGRADASI ISOAMIL  
ASETAT DENGAN RADIKAL OH DALAM FASE GAS MENGGUNAKAN  
METODE TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN**

Muhammad Bahy Akram  
17/409475/PA/17782

**INTISARI**

Telah dilakukan kajian teoritis mekanisme degradasi isoamil asetat dengan radikal OH pada fase gas menggunakan metode teori fungsional kerapatan (*Density Functional Theory/DFT*). Tujuan penelitian ini yaitu mencari energi aktivasi, keadaan transisi, mekanisme reaksi degradasi isoamil asetat, dan pengaruh degradasi isoamil asetat dengan radikal •OH pada pemanasan global. Metode DFT yang digunakan untuk mengkaji mekanisme degradasi antara isoamil asetat dengan radikal •OH adalah *Unrestricted B3LYP* dengan *basis set* 6-311++G (3df, 3pd).

Hasil yang diperoleh dari penelitian ini yaitu energi aktivasi reaksi jalur nomor 4 (R4) yang merupakan abstraksi atom H pada karbon tersier memiliki energi aktivasi terendah sebesar 6,0 kJ/mol. Keadaan transisi yang paling stabil juga didapatkan pada struktur keadaan transisi nomor 4 (TS4) sebagai perpindahan atom H dari atom karbon tersier ke atom oksigen pada radikal •OH. Mekanisme reaksi R4 dan keadaan transisi TS4 memiliki energi terendah dan kestabilan tertinggi karena posisi abstraksi atom H pada atom karbon tersier mudah dilepaskan. Hal tersebut dikarenakan dorongan hiperkonjugasi dari ikatan antar karbon tersier sehingga mudah terdegradasi oleh radikal •OH. Energi aktivasi tertinggi sebesar 45,1 kJ/mol ada pada abstraksi reaksi nomor 6 (R6) yang merupakan reaksi adisi, sehingga reaksi ini sulit terjadi. Waktu hidup degradasi isoamil asetat dengan radikal •OH melalui R4 di atmosfer diperkirakan berlangsung selama 1,24 hari sehingga diprediksi kontribusi degradasi isoamil asetat dengan radikal •OH tidak banyak berpengaruh pada pemanasan global karena waktu hidupnya yang cukup singkat.

Kata kunci: degradasi isoamil asetat, pemanasan global, radikal •OH, Teori Fungsional Kerapatan (DFT)

## DETERMINATION OF REACTION MECHANISM OF ISOAMYL ACETATE DEGRADATION WITH OH RADICAL IN GAS PHASE BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

Muhammad Bahy Akram  
17/409475/PA/17782

### ABSTRACT

Determination of isoamyl acetate degradation with OH radical in gas phase reaction mechanism has been conducted. The purpose of the experiment was to calculate activation energy, rate constant of isoamyl degradation reactions and the effect of isoamyl acetate degradation with •OH radical in global warming. The DFT method that was used to study the mechanism between isoamyl acetate and •OH radical was *Unrestricted* B3LYP with *basis set* 6-311++G (3df, 3pd).

The result from this research showed that the activation energy of mechanism reaction of R4 as the abstraction of hydrogen atom in tertiary carbon were 6.0 kJ/mol was calculated as the lowest activation energy. The transition state of TS4 which is the structure of transiting abstraction of hydrogen atom in tertiary carbon was also found as the most stable position. The reaction mechanism and transition state of isoamyl acetate degradation was more likely follows reaction R4 and TS4 because of the lowest activation energy and most stable transition phase. The high stability in R4 is caused by repulsive force of hyperconjugation and intercarbon bond in tertiary carbon making the hydrogen easier to be abstracted by •OH radical. The reaction R6 as addition reaction has the highest energy activation at 45.1 kJ/mol resulting of small possibility to occur. The calculated lifetime of isoamyl acetate degradation with •OH radical by mechanism of R4 was 1.24 days. Therefore, its influence on global warming are predicted to be insignificant because of its short atmospheric lifetime.

Keywords: OH radical, degradation of isoamyl acetate, Density Functional Theory, global warming