

## **KAJIAN TEORITIS MEKANISME REAKSI DEGRADASI 2-ASETIL-1-PIROLIN DENGAN RADIKAL OH DALAM FASA GAS MENGGUNAKAN PENDEKATAN TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN**

RAHMI MULIA RAMADHANI

17/409485/PA/17792

### **INTISARI**

Kajian teoritis mekanisme reaksi degradasi 2-asetil-1-pirolin dengan radikal OH dalam fasa gas menggunakan metode teori fungsi kerapatan telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menentukan nilai energi aktivasi, keadaan transisi, mekanisme reaksi degradasi 2-asetil-1-pirolin dan pengaruh degradasi 2-asetil-1-pirolin dengan OH radikal pada pemanasan global. Metode yang digunakan yaitu metode DFT berkolerasi B3LYP/6-311++G (3df, 3pd) tiap senyawa, reaktan, keadaan transisi, dan produk. Selanjutnya dilakukan perhitungan nilai energi bebas Gibbs relatif, laju reaksi dan waktu hidup di atmosfer.

Hasil yang diperoleh dari penelitian ini yaitu energi aktivasi pada mekanisme reaksi R3 merupakan abstraksi atom H radikal dari 2-asetil-1-pirolin oleh radikal OH pada posisi atom C sekunder yang bersebelahan dengan atom Nitrogen dengan nilai sebesar 5,7 kJ/mol. Keadaan transisi paling stabil juga pada keadaan transisi reaksi TS3 sebagai perpindahan atom H dari C sekunder heterosiklik ke atom Oksigen pada OH radikal yang mudah dilepaskan. Mekanisme reaksi R3 dan keadaan transisi TS3 memiliki energi terendah dan kestabilan yang tinggi karena posisi abstraksi atom H pada atom C sekunder heterosiklik, hal ini dikarenakan adanya dorongan hiperkonjugasi dari ikatan antar karbon sekunder lainnya sehingga mudah terdegradasi oleh OH radikal. Waktu hidup degradasi 2-asetil-1-pirolin dengan OH radikal melalui R3 di atmosfer diperkirakan berlangsung selama  $3 \times 10^{-6}$  s sehingga diprediksi kontribusi degradasi 2-asetil-1-pirolin dengan OH radikal tidak berpengaruh terhadap pemanasan global karena waktu hidup yang sangat singkat.

Kata Kunci: 2-asetil-1-pirolin, degradasi, DFT, radikal OH

## **THEORETICAL STUDY OF THE REACTION MECHANISM OF 2-ACETYL-1-PIRROLE DEGRADATION WITH OH RADICAL IN GAS PHASE USING FUNCTIONAL DENSITY BASED ON THEORY**

RAHMI MULIA RAMADHANI

17/409485/PA/17792

### **ABSTRACT**

The mechanism of the gas phase degradation reaction of 2-acetyl-1-pyrroline with OH radicals has been theoretically studied utilizing the density function theory. The aim of this work was to quantify the activation energy, the transition state, the mechanism of the 2-acetyl-1-pyrroline degradation reaction, and the contribution of this reaction to global warming. Each chemical, reactant, transition state, and product are studied using the DFT approach with B3LYP/6-311++G (3df, 3pd) correlation. The relative Gibbs energy, reaction rate, and atmospheric lifetime were then computed.

According to the findings of this study, the abstraction of the H radical from 2-acetyl-1-pyrroline by the OH radical at the site of the secondary C atom next to the Nitrogen atom has an activation energy of the reaction mechanism R3 of 5.7 kJ/mol. The H atom changes from the heterocyclic secondary C to the Oxygen atom on the readily released OH radical in the transition state of the TS3 reaction, making it the most stable transition state. The abstraction position of the H atom on the heterocyclic secondary C atom, which results from the hyperconjugation drive of the bonds between other secondary carbons so that they are easily degraded by OH radicals, gives rise to the reaction mechanism R3 and the transition state TS3, which have the lowest energy and highest stability. It is projected that the contribution of the breakdown of 2-acetyl-1-pyrroline with OH radicals has no effect on global warming since the life duration of the reaction with OH radicals through R3 in the atmosphere is estimated to last for  $3 \times 10^{-6}$  s.

**Keywords:** 2-acetyl-1-pyrroline, degradation, DFT, OH radicals