

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>iii</b>
<b>SURAT PERNYATAAN</b>	<b>iii</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>vii</b>
<b>INTISARI</b>	<b>vii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>ix</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>4</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Efek VOCs terhadap pemanasan global	4
II.1.2 Waktu hidup VOCs dalam atmosfer	5
II.1.3 Mekanisme reaksi degradasi VOCs oleh OH radikal	6
II.1.4 Kinetika degradasi 2-asetil-1-pirolin oleh OH radikal	7
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	8
II.2.1 Perumusan Hipotesis I	8
II.2.2 Perumusan Hipotesis II	8
II.2.3 Rancangan Penelitian	8
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>11</b>
III.1 Prosedur Optimasi Geometri dan Frekuensi Reaktan, Keadaan Transisi dan Produk Reaksi	11
III.2 Kajian Kinetika Degradasi 2-Asetil-1-Pirolin oleh Radikal OH dalam Fasa Gas	11
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>13</b>
IV.1 Optimasi Geometri Kompleks Reaktan	13
IV.2 Hasil Optimasi Geometri Keadaan Transisi (TS) dan Kompleks Produk (PC) pada Skema I	14
IV.3 Hasil Optimasi Geometri Keadaan Transisi (TS) dan Kompleks Produk (PC) pada Skema II	18
IV.4 Hasil Optimasi Geometri Keadaan Transisi (TS) dan Kompleks Produk (PC) pada Skema III	21

IV.5 Hasil Optimasi Geometri Keadaan Transisi (TS) dan Kompleks Produk (PC) pada Skema IV	25
IV.6 Hasil Optimasi Geometri Keadaan Transisi (TS) dan Kompleks Produk (PC) pada Skema V	28
IV.7 Hasil Perhitungan Energi Relatif Keadaan Transisi (TS) dan Kompleks Produk (PC)	31
IV.8 Kinetika Mekanisme Degradasi 2-Asetil-1-Pirolin oleh Radikal OH	33
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>37</b>
V.1 Kesimpulan	37
V.2 Saran	37
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>38</b>
<b>LAMPIRAN</b>	<b>41</b>

## DAFTAR GAMBAR

Gambar I.1	Struktur 2-asetil-1-pirolin	2
Gambar II.1	Skema reaksi degradasi 2-asetil-1-pirolin oleh OH radikal	9
Gambar IV.1	Visualisasi optimasi geometri RC; (a) 2-Asetil-1-Pirolin; (b) Radikal OH; (c) Kompleks Reaktan 2-Asetil	13
Gambar IV.2	Reaksi radikal skema I	15
Gambar IV.3	Visualisasi hasil komputasi skema I; (a) Keadaan Transisi I; (b) Produk Kompleks I	15
Gambar IV.4	Visualisasi Kerapatan densitas (a) Transisi I; (b) Produk I	18
Gambar IV.5	Reaksi radikal skema II	18
Gambar IV.6	Visualisasi hasil komputasi skema II; (a) Keadaan Transisi II; (b) Produk Kompleks II	19
Gambar IV.7	Visualisasi Kerapatan densitas (a) Transisi II; (b) Produk II	21
Gambar IV.8	Reaksi radikal skema III	21
Gambar IV.9	Visualisasi hasil komputasi skema III; (a) Keadaan Transisi III; (b) Produk Kompleks III	22
Gambar IV.10	Visualisasi Kerapatan densitas (a) Transisi III; (b) Produk III	25
Gambar IV.11	Reaksi radikal skema IV	25
Gambar IV.12	Visualisasi hasil komputasi skema IV; (a) Keadaan Transisi IV; (b) Produk Kompleks IV	26
Gambar IV.13	Visualisasi Kerapatan densitas (a) Transisi IV; (b) Produk IV	28
Gambar IV.14	Reaksi radikal skema V	28
Gambar IV.15	Visualisasi hasil komputasi skema V; (a) Keadaan Transisi V; (b) Produk Kompleks V	29
Gambar IV.16	Visualisasi Kerapatan densitas (a) Transisi V; (b) Produk V	31
Gambar IV.17	Perhitungan komputasi DFT reaksi degradasi 2-asetil-1-pirolin oleh radikal •OH.	32

## DAFTAR TABEL

Tabel IV.1 Panjang ikatan transisi dan produk hasil optimasi geometri skema I	16
Tabel IV.2 Panjang ikatan transisi dan produk hasil optimasi geometri skema II	19
Tabel IV.3 Panjang ikatan transisi dan produk hasil optimasi geometri skema III	23
Tabel IV.4 Panjang ikatan transisi dan produk hasil optimasi geometri skema IV	26
Tabel IV.5 Panjang ikatan transisi dan produk hasil optimasi geometri skema V	29
Tabel IV.6 Perbandingan Energi Gibbs Relatif Mekanisme Reaksi degradasi 2AP oleh radikal $\bullet\text{OH}$	31
Tabel IV.7 Hasil perhitungan $\Delta^1G^*$ dan $k(T)$ mekanisme reaksi degradasi 2AP pada suhu 298 K	34