

## ABSTRAK

**DEUIT WIDYA** : Pengembangan Lembar Kerja *POE* untuk Pemodelan Reaksi Substitusi Benzena Berbasis Aplikasi *NwChem*

Penelitian ini dilatarbelakangi pentingnya suatu lembar kerja dalam proses sains khususnya pada mata kuliah kimia organik I pada topik reaksi substitusi benzena. Tujuan penelitian ini menyusun lembar kerja berbasis *POE* untuk pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem*, menentukan kelayakan lembar kerja yang telah dibuat dan menentukan harga  $\Delta H$  reaksi substitusi benzena berdasarkan data hasil perhitungan *NwChem*. Lembar kerja dibuat menggunakan metode *DBR* dengan rangkaian tahapan model *ADDIE*. Prosedur lembar kerja mengikuti hasil dari penelitian pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem*. Format lembar kerja yang telah dihasilkan selanjutnya dilakukan uji validasi. Hasil uji validasi empat validator terhadap format lembar kerja berbasis *POE* pada pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem* dinyatakan telah memenuhi syarat (valid), dengan nilai rata-rata  $r_{hitung}$  yang diperoleh sebesar 0,92. Dari hasil pemodelan reaksi substitusi benzena berbasis aplikasi *NwChem* didapatkan  $\Delta H$  reaksi pembentukan *o*-bromotoluena, *m*-bromotoluena, *p*-bromotoluena, *o*-nitrotoluena, *m*-nitrotoluena, *p*-nitrotoluena dari reaktan toluena, *o*-dibromobenzena, *m*-dibromobenzena, *p*-dibromobenzena dari bromobenzena, *o*-dinitrobenzena, *m*-dinitrobenzena, *p*-dinitrobenzena, *o*-bromonitrobenzena, *m*-bromonitrobenzena, dan *p*-bromonitrobenzena dari nitrobenzena masing-masing sebesar -195342,0013 kJ/mol, - 195342,7508 kJ/mol, -195339,7348 kJ/mol, -196135,3371 kJ/mol, -196141,5211 kJ/mol, - 196153,2944 kJ/mol, -230938,1493 kJ/mol, -230950,6876 kJ/mol, - 230950,9247 kJ/mol, -627678,5521 kJ/mol, -627678,5521 kJ/mol, -627763,785 kJ/mol, - 627767,7990 kJ/mol, -164978,9929 kJ/mol, -164968,8371 kJ/mol, - 203055,7046 kJ/mol.

**Kata Kunci** : Lembar kerja, *predict*, *observe*, *explain*, reaksi substitusi benzena, *NwChem*