

ABSTRAK

DWI MARFALI : Pengembangan Lembar Kerja Berbasis *Predict-Observe-Explain* Untuk Pemodelan Reaksi S_N2 Pada Alkil Halida Menggunakan *NwChem*

Penelitian ini bertujuan menyusun lembar kerja berbasis *predict-observe-explain* untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*, menentukan kelayakan lembar kerja, serta menentukan energi aktivasi dan ΔH reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*. Lembar kerja dibuat menggunakan metode *DBR* dengan rangkaian tahapan model *ADDIE*. Prosedur lembar kerja mengikuti hasil dari percobaan perhitungan untuk menentukan energi aktivasi dan ΔH reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem*. Format lembar kerja yang telah dihasilkan selanjutnya dilakukan uji validasi. Hasil uji validasi tiga validator terhadap format lembar kerja berbasis *predict-observe-explain* untuk pemodelan reaksi S_N2 pada alkil halida menggunakan *NwChem* dinyatakan telah memenuhi syarat (valid), dengan nilai rata-rata r_{hitung} yang diperoleh sebesar 0,83. Hasil perbandingan untuk nilai ΔH reaksi S_N2 antara ion hidroksida direaksikan dengan metilklorida > butilklorida > isopropilklorida < t-butilklorida. Sedangkan ΔH reaksi S_N2 antara ion hidroksida direaksikan dengan metilfluorida < metiliodida > metilbromida. Perbandingan nilai energi aktivasi ion hidroksida direaksikan dengan metilklorida > butilklorida < isopropilklorida > t-butilklorida. Sedangkan energi aktivasi antara ion hidroksida direaksikan dengan metilfluorida < metiliodida > metilbromida < metilklorida. Untuk perbandingan nilai energi aktivasi dan ΔH reaksi S_N2 antara metilklorida yang direaksikan dengan ion hidroksida lebih besar dibandingkan direaksikan dengan air.

Kata Kunci: Lembar kerja *POE*, reaksi S_N2 , alkil halida, *NwChem*