

**KAJIAN SIFAT ELEKTRONIK SENYAWA HIDROKARBON AROMATIK  
POLISIKLIS (PAH) SEBAGAI *FINITE-SIZE* GRAFENA DENGAN  
METODE TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN (DFT)**

Hafiz Aji Aziz  
16/403616/PPA/05133

Kajian terhadap sifat elektronik beberapa senyawa hidrokarbon aromatik polisiklis (PAH) menggunakan metode teori fungsional kerapatan (DFT) telah dilakukan. Penelitian bertujuan untuk menentukan pengaruh ukuran, bentuk dan cacat struktural pada senyawa PAH terhadap sifat dan struktur elektroniknya.

Perhitungan tahap pertama adalah menentukan metode kimia komputasi yang paling akurat. Penentuan metode komputasi dilakukan dengan bervariasi *functional hybrid* dalam DFT. Tahap kedua adalah menggunakan metode terpilih untuk melakukan optimasi geometri molekul dan menghitung rapat keadaan (*Density of States*, DOS) serta struktur orbital.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa tingkat energi HOMO ( $E_{\text{HOMO}}$ ) naik dan tingkat energi LUMO ( $E_{\text{LUMO}}$ ) turun secara logaritmik dengan meningkatnya jumlah cincin untuk semua geometri molekul PAH. Laju perubahan tingkat energi orbital bervariasi dari satu geometri ke yang lain dengan geometri linier yang memiliki laju perubahan tingkat energi orbital yang paling tinggi. Nilai DOS pada *frontier orbital* tidak terpengaruh ukuran dan hanya dipengaruhi bentuk dengan rata-rata 1 pasangan elektron/eV untuk geometri linier, zigzag dan *rhombic* serta rata-rata 2 pasangan elektron/eV untuk geometri heksagonal. Adanya cacat struktural dalam molekul relatif tidak mempengaruhi nilai DOS. Nilai Eg akan naik pada PAH dengan cacat struktural pada posisi *arm chair* dan akan semakin mendekati nilai Eg pada PAH *rhombic* seiring bertambahnya ukuran PAH.

**Kata Kunci:** *Polycyclic Aromatic Hydrocarbon*, pengaruh bentuk, pengaruh ukuran, pengaruh cacat struktural, DFT

**STUDY ON THE ELECTRONIC PROPERTIES OF POLYCYCLIC  
AROMATIC HYDROCARBONS (PAHs) AS FINITE-SIZE GRAPHENE  
USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD**

Hafiz Aji Aziz  
16/403616/PPA/05133

Study of the electronic properties of some Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) compounds using Density Functional Theory (DFT) method has been performed. The objectives of this study were to investigate the effect of size, shapes and structural defects of PAHs on their electronic structure and properties.

The first step of the calculation was determination of the most accurate computational chemistry method. Determination of method was performed by varying the hybrid functionals used in the DFT calculation. The second step was using the selected method to perform geometric optimization on the molecules and calculate density of states (DOS) and orbitals structure.

The calculation results showed that the energy level of HOMO ( $E_{\text{HOMO}}$ ) increased and the energy level of LUMO ( $E_{\text{LUMO}}$ ) decreased logarithmically as the number of rings increased for all PAH molecular geometries. The rate of the orbital energy change is varied from one geometry to the other with the linear geometry has the highest rate of change. The DOS on the frontier orbitals was not affected by the size and only affected by the geometry with the value of approximately 1 electrons pair/eV for linear, zigzag and rhombic geometry and 2 electrons pair/eV for hexagonal geometry. The presence of structural defect of the molecule did not relatively affect the DOS. Eg value would increase on PAHs with structural defect on the arm chair position and converging to the Eg of rhombic PAH as the size increased.

**Keywords:** Polycyclic Aromatic Hydrocarbon, effect of shapes, effect of size , effect of structural defect, DFT