

STUDI TEORITIS SENYAWA TURUNAN BIS-KALKON TERHADAP RESPONS OPTIK NONLINIER

Septiana Nur Zanah
17/409489/PA/17796

INTISARI

Kajian secara teoritis telah dilakukan untuk mempelajari potensi senyawa turunan bis-kalkon sebagai material optik nonlinier. Molekul yang dikaji adalah senyawa bis-kalkon dengan substituen R_1 yaitu $N(CH_3)_2$, OCH_3 , OH , Cl dan Br yang terikat pada cincin fenil dan substituen R_2 yaitu H , CH_3 dan benzil yang terikat pada cincin piperidon. Optimasi geometri molekul dilakukan dengan metode DFT/B3LYP/6-311++G(d,p) dan dibandingkan dengan data eksperimen. Analisis transisi elektronik dilakukan untuk melihat perubahan energi HOMO-LUMO dan spektra UV-Vis menggunakan metode TD-DFT. Perhitungan frekuensi Raman untuk menentukan nilai-nilai aktivitas NLO yaitu μ , α , $\Delta\alpha$ dan β .

Hasil optimasi geometri diperoleh panjang ikatan seperti C-C, C=C, C-O, C=O, C-Cl, dan C-Br telah sesuai dengan hasil eksperimen. Celah energi HOMO-LUMO berkisar 3,27–3,82 eV. Hasil spektra UV-Vis yang diperoleh menunjukkan adanya puncak serapan maksimum pada daerah 360-380 nm untuk senyawa bis-kalkon 1, 3, 4, dan 5, sedangkan senyawa bis-kalkon 2 pada daerah 421-426 nm yang merupakan daerah sinar tampak. Berdasarkan hasil perhitungan beberapa parameter GCRD menunjukkan bahwa senyawa 2 dengan substituen $N(CH_3)_2$ memiliki stabilitas yang lebih rendah dan reaktivitas yang lebih tinggi dibandingkan senyawa lainnya. Hal ini dikarenakan $N(CH_3)_2$ bersifat sebagai donor elektron yang sangat kuat. Hiperpolarisabilitas pertama (β) sekitar 14 hingga 42 kali lebih besar dibanding urea sebagai standar material NLO. Hal tersebut menunjukkan senyawa bis-kalkon ini memiliki potensi yang baik sebagai material optoelektronik. Senyawa 2 tersubstitusi $N(CH_3)_2$ menunjukkan respons NLO yang paling besar.

Kata kunci: Bis-kalkon, DFT, optik nonlinier, hiperpolarisabilitas

THEORETICAL STUDY OF BIS-CHALCONE DERIVATIVE COMPOUNDS ON NONLINEAR OPTICAL RESPONSES

Septiana Nur Zanah
17/409489/PA/17796

ABSTRACT

Theoretical studies have been carried out to study the potential of bis-chalcone derivatives as nonlinear optical materials. The molecules studied were bis-chalcone compounds with substituents R_1 are $N(CH_3)_2$, OCH_3 , OH , Cl and Br bonded to phenyl ring and substituents R_2 are H , CH_3 and benzyl bonded to piperidone ring. Molecular geometry optimization was carried out using the method DFT/B3LYP/6-311++G(d,p) and compared with experimental data. Electronic transition analysis was performed to observe the energy changes of HOMO-LUMO and UV-Vis spectra using the TD-DFT method. Raman frequency calculations to determine the values of NLO activity are μ , α , $\Delta\alpha$ and β .

The results of geometry optimization obtained bond lengths such as C-C, C=C, C-O, C=O, C-Cl, and C-Br were in according with the experimental results. The HOMO-LUMO energy gap ranges from 3.27–3.82 eV. The results of the UV-Vis spectra showed that there was a maximum absorption peak in the region of 360-380 nm for bis-chalcone compounds 1, 3, 4, and 5, while bis-chalcone compounds 2 in the region of 421-426 nm which is the visible light region. Based on the calculation results of several GCRD parameters, it shows that compound 2 with $N(CH_3)_2$ as substituent has lower stability and higher reactivity than other compounds. This is because $N(CH_3)_2$ is a very strong electron donor. The first hyperpolarizability (β) is about 14 to 42 times greater than that of urea as a standard NLO material. This shows that this bis-chalcone compound has a good potential as an optoelectronic material. Compound 2 substituted $N(CH_3)_2$ showed the greatest NLO response.

Keywords: Bis-chalcone, DFT, nonlinear optical, hyperpolarizability