

ABSTRACT

This study is to learn the radiationless decay in butadiene isomerization based on Potential Energy Surface (PES). The case study is isomerization of cis- to trans-butadiene. Radiationless decay is electronic deexcitation without emitting light. Radiationless decay seems to violate the energy conservation. The adsorbed energy during the electronic excitation should be emitted during deexcitation hence the energy is conserved. Energi yang diserap saat eksitasi harusnya di pancarkan agar konservasi energi terpenuhi. However, this does not happen in the deexcitation butadiene. This phenomenon can be explained through conical intersection mechanism. Conical intersection mechanism requires a degeneration between ground state and excited state. The aim of this study is to calculate the energy difference of butadiene in transition geometry between ground state and excited state with the basis of ab-initio calculations. Ab-initio calculations are done at ground state using Density Functional Theory (DFT), at excited state using Configuration Interaction (CI), and Complete Active Space (CAS). DFT both find the optimized molecular structures and calculate the energy; while CI only to calculate the energy thus CAS is used to find the optimized molecular structures. The result is that the energy difference is 0.005 eV. This difference is very small and indicates that the degeneration indeed occurs at the transition butadiene between ground state and excited state. The conclusion is that conical intersection may occur in the butadiene isomerization.

Keywords: radiationless decay, isomerization, cis-butadiene, trans-butadiene, PES.

KATA PENGANTAR

Studi ini adalah tugas akhir yang dilakukan untuk syarat kelulusan di program studi Fisika, fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga. Studi ini menjelaskan fenomena *radiationless decay* pada molekul Butadiena berdasarkan *potential energy surface* (PES). Normalnya, peristiwa *radiationless decay* terjadi dengan mengeluarkan cahaya. Namun, pada molekul Butadiena *radiationless decay* terjadi tanpa memancarkan cahaya.

Studi ini dirancang untuk mahasiswa tingkat strata satu (S1) yang sedang belajar untuk menyusun rumusan masalah dan metode penelitian untuk penelitian. Pada BAB 3 telah dipaparkan delapan langkah untuk memperoleh selisih energi dari molekul keadaan transisi pada *ground state* dan *excited state*. Setiap langkah dirancang untuk mempermudah pembaca dalam mempelajari studi ini.

Semua penjelasan dipaparkan pada BAB 4 studi ini. Hasil dan diskusi membahas mengenai setiap tahap pada BAB 3. Telah disertakan juga LAMPIRAN A (input kalkulasi Gaussian09) dan B (output kalkulasi Gaussian09) untuk mempermudah pembaca dalam mempelajari kalkulasi studi ini dengan lengkap.

Tabik,

Astrid Nur Jannah