

ABSTRAK

Tugas akhir ini mempelajari kestabilan molekul acetylcholine berdasarkan orbital molekuler hasil kalkulasi DFT. Objek pada studi ini adalah enam molekul ionik sederhana untuk menjelaskan molekul acetylcholine. Molekul acetylcholine pada keadaan netral dengan multiplicity duplet berada pada keadaan tidak stabil. Molekul acetylcholine dapat mencapai keadaan stabil dengan cara ionisasi. Proses ionisasi melibatkan dua besaran fisis, yaitu potensial ionisasi, dan selisih energi HOMO LUMO. Potensial ionisasi adalah energi yang dibutuhkan untuk melepaskan satu elektron. Hal ini berkaitan dengan selisih energi HOMO LUMO. Selisih energi HOMO LUMO yang kecil mengakibatkan molekul cenderung untuk melepaskan satu elektron dari HOMO. Tujuan dari tugas akhir ini adalah mengevaluasi kestabilan molekul acetylcholine berdasarkan potensial ionisasi dan selisih energi HOMO LUMO hasil kalkulasi DFT. DFT untuk mendapatkan optimisasi geometri dan menghitung energi total. Energi total ini digunakan untuk menghitung potensial ionisasi. Selain itu DFT juga menghasilkan orbital molekuler. Orbital molekuler yang disusun pada diagram level energi digunakan untuk menghitung selisih energi HOMO LUMO. Pada studi ini selisih energi HOMO LUMO molekul acetylcholine yang didapatkan adalah 0,31 eV. Angka ini menunjukkan nilai paling kecil dari keenam molekul ionik sederhana yang menjadi objek pada studi ini. Hal ini menunjukkan bahwa molekul acetylcholine paling mudah mengalami ionisasi.

Kata kunci: Acetylcholine, Ionisasi, Density Functional Theory, HOMO LUMO.

ABSTRACT

This study focuses on the stability of acetylcholine molecule according to molecular orbitals from DFT calculation results. The object of this study are six simple ionic molecules to explain acetylcholine molecule. Acetylcholine molecule on a neutral state with duplet multiplicity is on an unstable condition. The acetylcholine molecule can reach stability from an ionization process. The ionization process involves two physical unit, which are ionization potential and HOMO LUMO energy difference. Ionization potential is the energy needed to release one electron. This is related to the HOMO LUMO energy difference. A small HOMO LUMO energy difference causes the molecule to tends to release one electron from HOMO. The goal of this thesis is to evaluate acetylcholine molecule's stability based on ionization potential and HOMO LUMO energy difference from DFT calculation results. DFT is used to obtain geometry optimization and calculating the total energy. The total energy is then used to calculate ionization potential. Other than that, DFT also produces molecular orbitals. The molecular orbitals which are arranged on the energy level diagram are used to calculate the HOMO LUMO energy difference. On this study, the HOMO LUMO energy difference for acetylcholine molecule is found to be 0.31 eV. This value shows the smallest from the six simple ionic molecules which become the object of this study. This shows that acetylcholine molecule is the easiest to experience ionization.

Keywords: Acethylcholine, Ionization, Density Functional Theory, HOMO LUMO.