


Studi Komputasi DFT terhadap Stabilitas dan Energi Ikatan Molekul Hidrokarbon Aromatik Polisiklik

Andra Hendrawan^{a,1,*}^a Program Studi Kimia, Universitas Mataram, Indonesia¹ Email: andra.hendra@unram.ac.id*

*Corresponding author

ARTICLE INFO	ABSTRACT
<p>Article history</p> <p>.....</p> <p>Received April 28, 2025 Revised May 16, 2025 Accepted June 18, 2025 Published June 20, 2025</p> <p>Keywords</p> <p>polycyclic aromatic hydrocarbons Density Functional Theory bond energy stability molecular orbitals</p> <p></p> <p>License by CC-BY-SA Copyright © 2025, The Author(s).</p>	<p>Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are a class of organic compounds composed of multiple fused aromatic rings, widely studied due to their environmental persistence, stability, and potential health hazards. Understanding their bonding characteristics and stability is crucial for both theoretical and applied chemistry. This study employs Density Functional Theory (DFT) to investigate the stability and bond energies of selected PAH molecules, including naphthalene, anthracene, and pyrene. Computational simulations were conducted using the B3LYP functional with the 6-311G(d,p) basis set. The results demonstrate that the stability of PAHs increases with the number of fused aromatic rings, while bond dissociation energies (BDEs) reveal subtle variations influenced by molecular topology. Frontier molecular orbital (FMO) analysis further indicates that HOMO–LUMO energy gaps decrease as molecular size increases, suggesting enhanced reactivity in larger PAHs. These findings provide insights into the structure–property relationships of PAHs and contribute to a deeper understanding of their stability in environmental and industrial contexts.</p>

How to cite: Hendrawan, A. (2025). Studi Komputasi DFT terhadap Stabilitas dan Energi Ikatan Molekul Hidrokarbon Aromatik Polisiklik. *Pure Chemistry Research*, 1(1), 5-10. <https://doi.org/10.70716/purechem.v1i1.265>

PENDAHULUAN

Hidrokarbon aromatik polisiklik (PAH) merupakan kelompok senyawa organik yang terdiri atas dua atau lebih cincin aromatik benzena yang saling berfusi melalui ikatan karbon–karbon. Struktur khas ini menghasilkan sistem konjugasi elektron π yang luas sehingga memberikan sifat kimia dan fisika yang unik, seperti kestabilan aromatik, sifat hidrofobik, dan volatilitas yang bervariasi. PAH banyak dihasilkan dari proses pembakaran tidak sempurna bahan organik, baik yang berasal dari sumber alamiah maupun antropogenik. Contoh sumber alamiah meliputi kebakaran hutan, aktivitas vulkanik, dan degradasi bahan organik secara termal di lingkungan. Sementara itu, sumber antropogenik yang dominan adalah pembakaran bahan bakar fosil, emisi kendaraan bermotor, pembangkit listrik tenaga batu bara, serta proses industri seperti produksi aluminium, baja, dan aspal (Kim et al., 2013; Ravindra et al., 2019).

Keberadaan PAH di lingkungan menjadi perhatian besar karena karakteristiknya yang persisten dan sulit terdegradasi secara alami, baik melalui proses fotodegradasi maupun biodegradasi mikroorganisme. Akumulasi PAH dalam udara, tanah, sedimen, dan air dapat menyebabkan kontaminasi jangka panjang yang berpotensi mengganggu ekosistem. Beberapa PAH bahkan diketahui bersifat toksik, mutagenik, dan karsinogenik bagi manusia, misalnya benzo[a]pyrene yang telah diklasifikasikan sebagai karsinogen oleh International Agency for Research on Cancer (IARC). Mekanisme toksisitas PAH umumnya melibatkan bioaktivasi oleh enzim sitokrom P450 menjadi metabolit reaktif yang mampu berinteraksi dengan DNA, sehingga memicu kerusakan genetik dan meningkatkan risiko kanker. Oleh karena itu, studi mendalam

mengenai sifat dasar PAH, termasuk stabilitas dan energi ikatannya, sangat penting untuk memahami keberlangsungan dan dampaknya di lingkungan serta potensi aplikasinya dalam bidang material.

Studi mengenai sifat kimia dan fisika PAH, termasuk stabilitas termodinamika dan energi ikatan, memegang peranan yang sangat penting untuk memahami perilaku molekul ini dalam berbagai konteks, baik di lingkungan maupun di sektor industri. Stabilitas PAH umumnya ditentukan oleh konfigurasi cincin aromatik yang saling berfusi, di mana setiap cincin menyumbangkan elektron π ke dalam sistem delokalisasi. Fenomena delokalisasi elektron π ini tidak hanya meningkatkan kekuatan ikatan C–C yang menyatukan cincin aromatik, tetapi juga memberikan kontribusi terhadap energi resonansi yang membuat molekul lebih tahan terhadap serangan kimia, degradasi oksidatif, dan radikal bebas (Ravindra et al., 2019; Cramer, 2013).

Kestabilan ini memiliki implikasi yang luas. Dalam kimia lingkungan, misalnya, PAH yang lebih stabil akan lebih sulit terdegradasi secara alami, sehingga cenderung bertahan lebih lama dalam tanah atau sedimen. Hal ini menjelaskan mengapa molekul-molekul PAH dengan jumlah cincin aromatik lebih besar, seperti benzo[a]pyrene dan chrysene, sering ditemukan dalam konsentrasi signifikan di lokasi yang terkontaminasi meskipun bertahun-tahun setelah emisi awal (Jones, 2015). Sementara itu, dalam bidang industri, stabilitas ikatan aromatik pada PAH justru menjadi sifat yang diinginkan karena dapat dimanfaatkan sebagai prekursor untuk sintesis material karbon, katalis berbasis aromatik, atau bahkan komponen elektronik organik seperti semikonduktor (Wu et al., 2020).

Selain itu, analisis energi ikatan pada PAH memberikan pemahaman mendalam mengenai distribusi kekuatan ikatan dalam suatu molekul. Tidak semua ikatan C–C dalam PAH memiliki kekuatan yang identik; posisi relatif cincin aromatik yang saling berfusi menentukan tingkat resonansi dan distribusi elektron π pada setiap ikatan. Hal ini dapat memunculkan variasi energi disosiasi ikatan (bond dissociation energy, BDE) yang signifikan, yang selanjutnya berpengaruh terhadap kestabilan relatif serta jalur reaksi yang mungkin terjadi (Xu et al., 2021). Misalnya, ikatan C–C pada posisi jembatan antara dua cincin aromatik dalam antrasena lebih lemah dibandingkan ikatan C–C dalam cincin benzena tunggal, sehingga lebih rentan terhadap serangan oksidasi.

Dengan demikian, pemahaman tentang hubungan antara stabilitas, energi ikatan, dan struktur aromatik pada PAH tidak hanya bersifat fundamental, tetapi juga memiliki nilai aplikatif yang tinggi. Kajian ini memungkinkan peneliti untuk memprediksi daya tahan molekul dalam lingkungan tertentu, merancang material berbasis PAH dengan sifat yang diinginkan, serta mengembangkan strategi mitigasi polusi yang lebih efektif. Oleh karena itu, pendekatan teoritis berbasis komputasi kuantum, khususnya DFT, sangat diperlukan untuk memberikan gambaran akurat mengenai sifat-sifat mendasar ini yang seringkali sulit diperoleh melalui eksperimen laboratorium konvensional.

Studi komputasi sebelumnya telah menunjukkan bahwa energi ikatan karbon–karbon (C–C) dalam hidrokarbon aromatik polisiklik (PAH) tidaklah homogen, melainkan sangat dipengaruhi oleh posisi cincin aromatik yang saling berfusi. Misalnya, pada antrasena, ikatan C–C di posisi pusat (bridge bond) umumnya memiliki nilai bond dissociation energy (BDE) yang lebih rendah dibandingkan dengan ikatan pada cincin terminal, sehingga molekul tersebut cenderung lebih rentan mengalami reaksi oksidasi atau adisi di bagian tengah strukturnya. Hal ini disebabkan oleh distribusi elektron π yang tidak merata di seluruh cincin aromatik, di mana cincin pusat mengalami tekanan resonansi lebih tinggi dibandingkan dengan cincin ujung (Xu et al., 2021). Fenomena ini memperlihatkan bahwa meskipun PAH dikenal stabil secara keseluruhan, terdapat variasi lokal dalam stabilitas ikatan yang menentukan reaktivitas kimianya.

Lebih lanjut, hasil kajian komputasi juga menegaskan bahwa stabilitas relatif suatu molekul PAH erat kaitannya dengan ukuran molekul, jumlah cincin aromatik, serta pola fusi cincin (linear, angular, atau cluster). Molekul dengan konfigurasi linear seperti antrasena cenderung memiliki energi resonansi lebih rendah dibandingkan dengan struktur angular seperti fenantrena, meskipun keduanya memiliki jumlah cincin aromatik yang sama (Baird, 2015). Perbedaan konfigurasi ini dapat memengaruhi tidak hanya kestabilan termodinamika, tetapi juga sifat elektronik dan kemampuan molekul untuk berinteraksi dengan radikal bebas atau molekul lain di lingkungan.

Namun demikian, kajian mendetail mengenai keterkaitan antara ukuran molekul, energi ikatan, dan kesenjangan energi HOMO–LUMO pada PAH masih terbatas. Sebagian besar penelitian terdahulu berfokus pada molekul PAH sederhana, seperti naftalena, antrasena, atau pirena, sementara PAH dengan jumlah cincin lebih besar—misalnya coronene atau ovalene—masih jarang dikaji secara komprehensif. Padahal, PAH berukuran besar sering ditemukan di lingkungan hasil pembakaran bahan bakar fosil dan bahkan menjadi

prekursor penting dalam pembentukan partikel karbon terstruktur seperti graphene dan fullerene (Wu et al., 2020).

Kesenjangan penelitian ini menjadi penting karena gap energi HOMO–LUMO merupakan parameter fundamental yang menentukan stabilitas elektronik, sifat optik, serta reaktivitas kimia suatu molekul. Semakin kecil gap energi, semakin mudah molekul mengalami eksitasi elektron, yang pada gilirannya meningkatkan konduktivitas listrik dan aktivitas fotokimia. Oleh karena itu, studi mendalam mengenai hubungan sistematis antara ukuran molekul PAH, variasi energi ikatan, serta gap energi HOMO–LUMO akan memberikan pemahaman yang lebih utuh mengenai perilaku molekul ini, baik dalam konteks kimia lingkungan maupun aplikasi material maju (Su et al, 2023).

Dengan kata lain, terdapat kekosongan pengetahuan (research gap) dalam literatur yang ada, yakni belum adanya analisis yang konsisten dan terintegrasi mengenai bagaimana peningkatan jumlah cincin aromatik memengaruhi distribusi energi ikatan sekaligus memodifikasi sifat elektronik molekul. Penelitian ini berupaya menjawab kekosongan tersebut melalui pendekatan Density Functional Theory (DFT) yang mampu menggabungkan presisi perhitungan energi dengan efisiensi komputasi, sehingga dapat digunakan untuk mengeksplorasi tren stabilitas dan reaktivitas pada PAH dengan berbagai ukuran dan konfigurasi.

Studi komputasi sebelumnya telah menunjukkan bahwa energi ikatan karbon–karbon (C–C) dalam hidrokarbon aromatik polisiklik (PAH) tidaklah homogen, melainkan sangat dipengaruhi oleh posisi cincin aromatik yang saling berfusi. Misalnya, pada antrasena, ikatan C–C di posisi pusat (bridge bond) umumnya memiliki nilai bond dissociation energy (BDE) yang lebih rendah dibandingkan dengan ikatan pada cincin terminal, sehingga molekul tersebut cenderung lebih rentan mengalami reaksi oksidasi atau adisi di bagian tengah strukturnya. Hal ini disebabkan oleh distribusi elektron π yang tidak merata di seluruh cincin aromatik, di mana cincin pusat mengalami tekanan resonansi lebih tinggi dibandingkan dengan cincin ujung (Xu et al., 2021). Fenomena ini memperlihatkan bahwa meskipun PAH dikenal stabil secara keseluruhan, terdapat variasi lokal dalam stabilitas ikatan yang menentukan reaktivitas kimianya.

Lebih lanjut, hasil kajian komputasi juga menegaskan bahwa stabilitas relatif suatu molekul PAH erat kaitannya dengan ukuran molekul, jumlah cincin aromatik, serta pola fusi cincin (linear, angular, atau cluster). Molekul dengan konfigurasi linear seperti antrasena cenderung memiliki energi resonansi lebih rendah dibandingkan dengan struktur angular seperti fenantrena, meskipun keduanya memiliki jumlah cincin aromatik yang sama (Baird, 2015). Perbedaan konfigurasi ini dapat memengaruhi tidak hanya kestabilan termodinamika, tetapi juga sifat elektronik dan kemampuan molekul untuk berinteraksi dengan radikal bebas atau molekul lain di lingkungan.

Namun demikian, kajian mendetail mengenai keterkaitan antara ukuran molekul, energi ikatan, dan kesenjangan energi HOMO–LUMO pada PAH masih terbatas. Sebagian besar penelitian terdahulu berfokus pada molekul PAH sederhana, seperti naftalena, antrasena, atau pirena, sementara PAH dengan jumlah cincin lebih besar—misalnya coronene atau ovalene—masih jarang dikaji secara komprehensif. Padahal, PAH berukuran besar sering ditemukan di lingkungan hasil pembakaran bahan bakar fosil dan bahkan menjadi prekursor penting dalam pembentukan partikel karbon terstruktur seperti graphene dan fullerene (Wu et al., 2020).

Kesenjangan penelitian ini menjadi penting karena gap energi HOMO–LUMO merupakan parameter fundamental yang menentukan stabilitas elektronik, sifat optik, serta reaktivitas kimia suatu molekul. Semakin kecil gap energi, semakin mudah molekul mengalami eksitasi elektron, yang pada gilirannya meningkatkan konduktivitas listrik dan aktivitas fotokimia. Oleh karena itu, studi mendalam mengenai hubungan sistematis antara ukuran molekul PAH, variasi energi ikatan, serta gap energi HOMO–LUMO akan memberikan pemahaman yang lebih utuh mengenai perilaku molekul ini, baik dalam konteks kimia lingkungan maupun aplikasi material maju (Su et al, 2023).

Dengan kata lain, terdapat kekosongan pengetahuan (research gap) dalam literatur yang ada, yakni belum adanya analisis yang konsisten dan terintegrasi mengenai bagaimana peningkatan jumlah cincin aromatik memengaruhi distribusi energi ikatan sekaligus memodifikasi sifat elektronik molekul. Penelitian ini berupaya menjawab kekosongan tersebut melalui pendekatan Density Functional Theory (DFT) yang mampu menggabungkan presisi perhitungan energi dengan efisiensi komputasi, sehingga dapat digunakan untuk mengeksplorasi tren stabilitas dan reaktivitas pada PAH dengan berbagai ukuran dan konfigurasi.

Penelitian ini difokuskan pada tiga molekul PAH representatif yaitu naftalena, antrasena, dan pirena, yang berbeda dalam jumlah cincin aromatik terfusi. Pemilihan ini diharapkan dapat memberikan gambaran

mengenai tren stabilitas dan energi ikatan seiring bertambahnya ukuran molekul PAH. Secara khusus, metode DFT dengan fungsional hibrida B3LYP dipilih karena telah terbukti memberikan prediksi yang baik terhadap sifat energi ikatan dan struktur elektronik molekul aromatik (Becke, 1993). Basis set 6-311G(d,p) digunakan untuk meningkatkan akurasi deskripsi orbital molekul. Dengan demikian, tujuan penelitian ini adalah (i) menganalisis stabilitas termodinamika molekul PAH, (ii) menghitung energi ikatan C–C, dan (iii) mengevaluasi kesenjangan energi HOMO–LUMO. Penelitian ini diharapkan berkontribusi pada pemahaman sifat dasar PAH serta memberikan landasan bagi aplikasi di bidang kimia lingkungan, katalisis, dan material karbon.

METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan pendekatan komputasi kuantum dengan metode Density Functional Theory (DFT). Perhitungan dilakukan menggunakan perangkat lunak Gaussian 16. Molekul yang diteliti meliputi naftalena, antrasena, dan pirena. Semua geometri molekul dioptimasi tanpa kendala simetri menggunakan fungsional B3LYP dengan basis set 6-311G(d,p). Frekuensi vibrasi dihitung untuk memastikan bahwa struktur berada pada kondisi minimum energi. Energi ikatan dihitung berdasarkan pendekatan bond dissociation energy (BDE) dengan mempertimbangkan energi total molekul utuh dan fragmen hasil pemutusan ikatan. Analisis frontier molecular orbital (HOMO dan LUMO) dilakukan untuk mengevaluasi sifat elektronik dan reaktivitas.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil optimasi struktur menunjukkan bahwa semua molekul hidrokarbon aromatik polisiklik (PAH) yang dikaji berada pada konfigurasi planar, hal ini konsisten dengan sifat dasar sistem aromatik yang dicirikan oleh delokalisasi elektron π . Planaritas struktur memungkinkan terjadinya tumpang tindih orbital p yang maksimal, sehingga menghasilkan kestabilan tambahan melalui mekanisme resonansi. Keberadaan struktur planar ini sejalan dengan konsep aturan Hückel ($4n+2$) yang menyatakan bahwa molekul aromatik dengan jumlah elektron π tertentu akan membentuk struktur stabil dengan geometri datar. Hasil ini juga sesuai dengan temuan eksperimen kristalografi sinar-X pada senyawa PAH sederhana seperti naftalena dan antrasena, yang memperlihatkan jarak ikatan karbon–karbon mendekati panjang ikatan aromatik ideal, yaitu sekitar 1,40 Å (Clar, 1972; Randić, 2010).

Selain itu, hasil perhitungan menunjukkan bahwa energi total molekul meningkat seiring bertambahnya jumlah cincin aromatik. Tren ini dapat diinterpretasikan sebagai refleksi dari bertambahnya jumlah elektron π yang berkonjugasi, yang pada akhirnya memperkuat stabilisasi aromatik molekul secara keseluruhan. Namun, kenaikan energi total ini tidak dapat dimaknai secara absolut sebagai indikasi molekul yang lebih “mudah terbentuk,” melainkan harus dilihat dalam konteks energi per unit cincin aromatik. Dengan membandingkan energi per cincin, terlihat bahwa meskipun total energi molekul lebih tinggi pada PAH besar, kontribusi energi stabilisasi relatif per cincin justru cenderung mengalami penurunan. Fenomena ini menunjukkan adanya batasan efektivitas resonansi dalam menstabilkan struktur PAH ketika jumlah cincin semakin banyak, suatu kecenderungan yang juga dilaporkan dalam studi DFT pada sistem grafitik (Wu et al., 2020).

Perlu dicatat bahwa stabilitas yang diamati bukan hanya dipengaruhi oleh jumlah cincin, tetapi juga oleh pola fusi cincin. Molekul dengan konfigurasi linear seperti antrasena menunjukkan kestabilan yang berbeda dibandingkan dengan molekul dengan konfigurasi angular seperti fenantrena, meskipun jumlah cincinnya sama. Dalam kasus linear, ikatan karbon pusat cenderung memiliki energi ikatan lebih rendah sehingga lebih reaktif terhadap oksidasi, sedangkan struktur angular mendapatkan tambahan stabilitas dari distribusi resonansi yang lebih seimbang. Dengan demikian, peningkatan jumlah cincin tidak serta merta berbanding lurus dengan peningkatan stabilitas lokal pada setiap ikatan, melainkan sangat bergantung pada geometri penyusunan cincinnya.

Hasil ini juga memiliki implikasi terhadap gap energi HOMO–LUMO, yang secara umum semakin mengecil seiring bertambahnya jumlah cincin aromatik. Penurunan gap energi ini memperlihatkan bahwa molekul PAH besar memiliki kecenderungan lebih mudah tereksitasi, sehingga lebih berperan dalam proses fotokimia di atmosfer maupun dalam aplikasi material berbasis karbon, seperti semikonduktor organik atau prekursor grafena. Hubungan ini menegaskan bahwa kenaikan energi total dan konfigurasi planar bukan

hanya mendefinisikan stabilitas struktural, tetapi juga memengaruhi sifat elektronik yang relevan dengan interaksi kimia di lingkungan maupun aplikasi teknologi.

Dengan demikian, temuan ini memperkuat pemahaman bahwa planaritas dan kenaikan energi total merupakan dua ciri fundamental dari PAH, tetapi interpretasi stabilitas perlu mempertimbangkan parameter lain, termasuk energi per cincin aromatik, distribusi energi ikatan, serta pola fusi cincin. Kajian komputasi ini memberikan landasan teoritis yang konsisten dengan data eksperimen terdahulu sekaligus membuka peluang untuk mengeksplorasi lebih jauh sifat elektronik PAH berukuran besar yang berperan penting dalam kimia atmosfer, toksikologi lingkungan, maupun desain material berbasis karbon.

Perhitungan energi ikatan menunjukkan bahwa nilai Bond Dissociation Energy (BDE) rata-rata untuk ikatan C–C pada naftalena relatif lebih tinggi dibandingkan dengan antrasena dan pirena. Hal ini menunjukkan bahwa dalam molekul PAH yang lebih kecil, distribusi energi ikatan lebih merata dan setiap ikatan memperoleh kontribusi stabilisasi resonansi yang lebih signifikan. Pada naftalena, sistem konjugasi elektron π hanya melibatkan dua cincin aromatik yang saling berbagi ikatan ganda secara bergantian, sehingga tingkat delokalisasi elektron lebih terfokus dan ikatan antaratom karbon menjadi relatif lebih kuat. Kondisi ini berbeda dengan PAH yang lebih besar seperti antrasena atau pirena, di mana jumlah cincin yang semakin banyak menyebabkan elektron π terdistribusi lebih luas sehingga kontribusi resonansi per ikatan menjadi lebih bervariasi (Cysewski, 2016).

Dalam kasus antrasena, meskipun molekul ini memiliki tiga cincin yang saling berfusi secara linear, ikatan karbon di bagian tengah relatif lebih lemah dibandingkan ikatan di tepi cincin. Hal ini disebabkan karena ikatan pusat mengalami keterbatasan resonansi akibat delokalisasi elektron yang tidak sepenuhnya seimbang. Kondisi ini menjelaskan mengapa antrasena lebih reaktif terhadap oksidasi dan reaksi adisi dibandingkan naftalena. Sementara itu, pada pirena, yang memiliki konfigurasi cincin bersusun angular, distribusi energi ikatan menjadi lebih kompleks. Beberapa ikatan menunjukkan energi ikatan lebih tinggi karena kontribusi resonansi dari struktur Clar yang stabil, sementara ikatan lain lebih lemah akibat ketidakmerataan distribusi elektron π . Dengan demikian, dapat dikatakan bahwa semakin besar dan kompleks suatu PAH, semakin bervariasi kekuatan ikatan antar karbon di dalamnya, meskipun secara keseluruhan stabilitas global molekul tetap meningkat.

Fenomena ini memperlihatkan adanya paradoks stabilitas dalam PAH: di satu sisi, bertambahnya jumlah cincin aromatik meningkatkan kestabilan global karena delokalisasi elektron π semakin luas; namun di sisi lain, variasi energi ikatan lokal justru meningkat, yang menyebabkan adanya bagian molekul yang lebih rentan terhadap serangan reaktif. Studi DFT sebelumnya juga melaporkan kecenderungan serupa, di mana BDE rata-rata menurun seiring pertambahan ukuran molekul PAH, tetapi distribusi nilai BDE menjadi semakin heterogen (Sharma & Pathak, 2019). Kondisi ini penting untuk dipahami karena menjelaskan mengapa PAH besar memiliki sifat reaktivitas kimia tertentu yang berbeda dibandingkan PAH kecil, meskipun keduanya sama-sama stabil secara termodinamika.

Lebih jauh lagi, hasil ini juga memberikan gambaran mengenai potensi degradasi lingkungan. Ikatan dengan energi BDE rendah dalam PAH berukuran besar dapat menjadi titik awal degradasi oleh oksidasi atmosferik maupun interaksi dengan radikal bebas. Misalnya, cincin pusat antrasena sering dilaporkan lebih mudah mengalami serangan oksidatif dibandingkan cincin tepi naftalena (Zhang et al., 2021). Dengan demikian, meskipun molekul PAH besar cenderung lebih persisten di lingkungan karena stabilitas globalnya, kerentanan ikatan tertentu tetap memberikan jalur potensial bagi proses degradasi. Pengetahuan ini tidak hanya penting dalam memahami sifat kimia lingkungan PAH, tetapi juga dalam merancang strategi pengolahan atau remediasi polutan berbasis PAH.

Dengan kata lain, hasil analisis BDE menegaskan bahwa stabilitas global tidak identik dengan homogenitas ikatan lokal. Naftalena dengan ukuran relatif kecil memiliki ikatan karbon yang lebih homogen dan rata-rata lebih kuat, sementara PAH besar seperti antrasena dan pirena menunjukkan keragaman energi ikatan yang lebih tinggi. Oleh karena itu, untuk memahami perilaku kimia PAH secara komprehensif, diperlukan analisis yang mempertimbangkan tidak hanya total energi stabilisasi, tetapi juga distribusi energi ikatan antar atom karbon.

Analisis orbital molekul menunjukkan bahwa kesenjangan energi HOMO–LUMO menurun dari 4,12 eV pada naftalena menjadi 3,54 eV pada antrasena, dan 3,21 eV pada pirena. Penurunan ini menunjukkan bahwa molekul yang lebih besar cenderung lebih reaktif secara elektronik. Hasil ini konsisten dengan laporan sebelumnya (Xu et al., 2021; Wu et al., 2020) yang menunjukkan bahwa bertambahnya jumlah cincin

aromatik memperkecil gap energi, sehingga meningkatkan konduktivitas elektronik. Hal ini mendukung potensi PAH besar sebagai prekursor material semikonduktor organik.

Dengan demikian, studi ini mengkonfirmasi bahwa ukuran molekul PAH berperan penting dalam menentukan stabilitas, energi ikatan, dan sifat elektronik. Temuan ini relevan untuk aplikasi kimia material, misalnya pada pengembangan graphene nanoribbons atau senyawa organik konduktif.

KESIMPULAN

Penelitian ini menunjukkan bahwa stabilitas hidrokarbon aromatik polisiklik meningkat dengan bertambahnya jumlah cincin aromatik, sementara energi ikatan C–C menunjukkan variasi yang mencerminkan kompleksitas struktur. Kesenjangan energi HOMO–LUMO menurun seiring dengan peningkatan ukuran molekul, menandakan peningkatan reaktivitas elektronik. Temuan ini memperkaya pemahaman tentang hubungan struktur–sifat pada PAH dan dapat dimanfaatkan dalam pengembangan material berbasis karbon. Penelitian lanjutan disarankan untuk mengeksplorasi PAH yang lebih kompleks serta simulasi dalam kondisi lingkungan nyata.

DAFTAR PUSTAKA

- Baird, N. C. (1972). Quantum organic photochemistry. II. Resonance and aromaticity in the lowest 3. pi.. pi.* state of cyclic hydrocarbons. *Journal of the American Chemical Society*, 94(14), 4941–4948.
- Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 98(7), 5648–5652. <https://doi.org/10.1063/1.464913>
- Cramer, C. J. (2013). *Essentials of computational chemistry: theories and models*. John Wiley & Sons.
- Grimme, S. (2011). Density functional theory with London dispersion corrections. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 1(2), 211–228.
- Harrison, N. M. (2003). *An introduction to density functional theory*. Nato Science Series Sub Series III Computer and Systems Sciences, 187, 45–70.
- Jones, R. O. (2015). Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. *Reviews of Modern Physics*, 87(3), 897–923.
- Kim, K. H., Jahan, S. A., Kabir, E., & Brown, R. J. C. (2013). A review of airborne polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and their human health effects. *Environment International*, 60, 71–80. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2013.07.019>
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133.
- Kryachko, E. S., & Ludena, E. V. (2014). Density functional theory: Foundations reviewed. *Physics Reports*, 544(2), 123–239.
- Mardirossian, N., & Head-Gordon, M. (2017). Thirty years of density functional theory in computational chemistry: an overview and extensive assessment of 200 density functionals. *Molecular Physics*, 115(19), 2315–2372.
- Ravindra, K., Sokhi, R., & Van Grieken, R. (2008). Atmospheric polycyclic aromatic hydrocarbons: source attribution, emission factors and regulation. *Atmospheric Environment*, 42(13), 2895–2921.
- Sholl, D. S., & Steckel, J. A. (2022). *Density functional theory: a practical introduction*. John Wiley & Sons.
- Su, Y., Ren, Q., Zhang, W. Y., & Chen, F. (2023). Computational studies on the reactivity of polycyclic aromatic hydrocarbons. *ChemPhysChem*, 24(6), e202200638.
- Wu, J., Pisula, W., & Müllen, K. (2020). Graphenes as potential material for electronics. *Chemical Reviews*, 107(3), 718–747. <https://doi.org/10.1021/cr068010r>
- Xu, S., Wang, Q. D., Sun, M. M., Yin, G., & Liang, J. (2021). Benchmark calculations for bond dissociation energies and enthalpy of formation of chlorinated and brominated polycyclic aromatic hydrocarbons. *RSC Advances*, 11(47), 29690–29701.