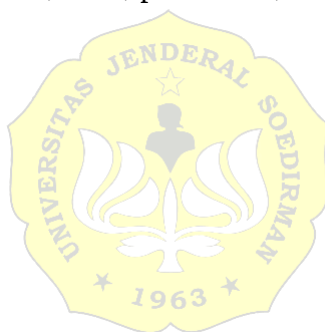


ABSTRAK

Optimasi geometri dalam kimia komputasi dilakukan untuk menemukan struktur paling stabil dari suatu molekul dengan energi paling minimum. Hal ini menjadi langkah penting dalam melakukan penelitian kimia komputasi, salah satunya untuk menentukan metode kimia komputasi terbaik. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan energi minimum serta menentukan metode kimia komputasi *Density Functional Theory* (DFT) yang terbaik menggunakan struktur molekul tetramer polietilena. Parameter seperti panjang ikatan, sudut ikatan, spektrum inframerah (IR), dan spektrum $^1\text{H-NMR}$ dari molekul tersebut dilakukan analisis yang didasarkan pada data eksperimental yang kemudian digunakan sebagai uji menentukan metode terbaik melalui *Prediction Residual Error of Sum Square* (PRESS). Hasil penelitian menunjukkan energi minimum dari struktur molekul tetramer polietilena sebesar -198.158,922588 kkal/mol menggunakan kombinasi metode DFT 6-311++G**/EDF1 dan nilai PRESS total sebesar 124.007,387167 yang menyatakan metode DFT 6-311++G**/B3LYP sebagai metode yang terbaik untuk molekul tetramer polietilena.

Kata kunci: Optimasi geometri, DFT, polietilena, inframerah, $^1\text{H-NMR}$, PRESS



ABSTRACT

*Geometry optimization in computational chemistry is carried out to find the most stable structure of a molecule with the minimum energy. This is an important step in conducting computational chemistry research, one of which is to determine the best computational chemistry method. This study aims to determine the minimum energy and determine the best Density Functional Theory (DFT) computational chemistry method using the polyethylene tetramer molecular structure. Parameters such as bond length, bond angle, infrared (IR) spectrum, and ^1H -NMR spectrum of the molecule were analyzed based on experimental data which were then used as a test to determine the best method through Prediction Residual Error of Sum Square (PRESS). The results showed the minimum energy of the polyethylene tetramer molecular structure was -198,158.922588 kcal/mol using a combination of the DFT 6-311++G**/EDF1 method and a total PRESS value of 124.007,387167 which stated that the DFT 6-311++G**/B3LYP method was the best method for the polyethylene tetramer molecule.*

Keywords: *Geometry optimization, DFT, polyethylene, infrared, ^1H -NMR, PRESS*

