

Analisa Penyerapan Cahaya Tampak Dalam Perubahan Isomer Pewarna Disperse Red 1 Menggunakan Pemodelan Komputasi Density Functional Theory = Analysis of Visible Light Absorption in Isomeric Changes of Disperse Red 1 Dyes Using Density Functional Theory Computational Modeling

Andini Dwi Sartika, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920528124&lokasi=lokal>

Abstrak

Disperse Red 1 (DR 1) adalah pewarna merah yang memiliki unsur kimia $C_{16}H_{18}N_4O_3$. DR 1 merupakan pewarna azo yang mempunyai sifat fotoisomerisasi reversibel. Pada pewarna azo perubahan dari trans ke cis dapat menyebabkan perubahan reversibel yang diinduksi cahaya pada beberapa pewarna, seperti DR 1. Perubahan struktur dari trans ke cis terjadi karena penyerapan cahaya ultraviolet (UV). Pada penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk mengetahui nilai spektrum serapan cahaya pada perubahan struktur molekul Disperse Red 1 isomer trans terhadap isomer 90° dan isomer cis, sehingga mengetahui besar pergeseran spektrum penyerapan cahaya karena penyerapan UV menggunakan metode komputasi density functional theory (DFT). Hasil analisa berdasarkan spektrum serapan optik didapatkan perubahan warna pada isomer trans, 90° , dan cis karena ketika trans menyerap sinar UV maka akan terjadi pergeseran molekul sehingga membentuk isomer 90° dan isomer cis, pada saat pergeseran inilah molekul menyerap energi cahaya sehingga mengalami perubahan warna.

.....Disperse Red 1 (DR 1) is a red dye with the chemical element $C_{16}H_{18}N_4O_3$. DR 1 is an azo dye with reversible photoisomerisation properties. Some azo dyes, including DR 1, undergo light-induced reversible transitions from trans to cis. Changes in structure from trans to cis occur due to ultraviolet (UV) light absorption. This study aimed to determine the value of changes in the molecular structure of Disperse Red 1 trans isomer to 90° isomer and cis isomer, on the light absorption spectrum in order to determine the magnitude of the shift in the light absorption spectrum due to UV absorption using the density functional theory (DFT) computational method. Based on the optical absorption spectrum, the analysis revealed colour changes in the trans, 90° , and cis isomers. When the trans-absorbed UV light, a molecular shift occurred to form the 90° isomer and the cis isomer. The molecule absorbed light energy during this shift, causing it to change colour.