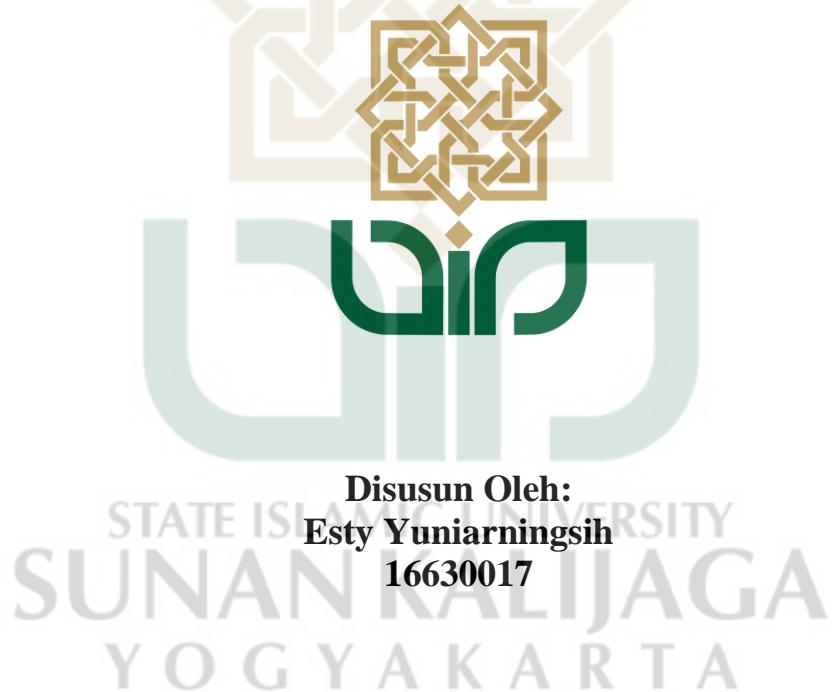


STUDI KOMPUTASI SINTESIS (5-ALIL-2,3-DIMETOKSIFENIL)-BENZOFENON DARI SENYAWA METIL EUGENOL DAN UJI TEORITIKNYA SEBAGAI SENYAWA TABIR SURYA MENGGUNAKAN METODE DFT-B3LYP

**Skripsi
Untuk memenuhi sebagian
persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia**



**PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2021**

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-STUINSK-BM-05-C/R0

PERSETUJUAN TUGAS AKHIR / SKRIPSI

Hal : Persetujuan Tugas Akhir

Lamp : -

Kepada:

Yth. Ketua Program Studi Kimia

Fakultas Saintek UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di tempat

Assalaamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa proposal skripsi Saudara:

Nama : Esty Yuniaringsih

NIM : 16630017

Prodi / smt : Kimia/X

Judul Skripsi : Studi Komputasi Jalur Sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon
Sebagai Senyawa Tabir Surya dengan Metode DFT-B3LYP

sudah dapat diseminarkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalaamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 22 Juli 2021

Pembimbing



Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.

NIP: 19760621 199903 2 005

NOTA DINAS KONSULTAN



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-STUINSK-BM-05-C/R0

NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp :-

Kepada:

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di tempat

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa proposal skripsi saudara:

Nama : Esty Yunita Ningih

NIM : 16630017

Pruji / smt : Kimia/X

Judul Skripsi : Studi Komputasi Sintesis (S-ahil-2,3-dimetoksifenil)-Benzofenon
dari Senyawa Metil Eugenol dan Uji Teoritiknya Sebagai Senyawa
Tabir Surya Menggunakan Metode DFT-B3LYP

sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan, atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

Wassalamualaikum wr. wb.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 18 Agustus 2021

Konsultan,

Priyagung Dhemi Widrakongko, M.Sc.
NIP. 19900330 201903 1 008

NOTA DINAS KONSULTAN



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga

FM-STUINSK-BM-05-C/R0

NOTA DINAS KONSULTAN

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp : -

Kepada:

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UTN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di tempat

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa proposal skripsi saudara:

Nama : Esty Yuniarningsih

NIM : 16630017

Prodi / smt : Kimia/X

Judul Skripsi : Studi Komputasi Sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-Benzofenon
dari Senyawa Metil Eugenol dan Uji Terdiriknya Sebagai Senyawa
Tabir Surya Menggunakan Metode DFT-B3LYP

sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan, atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 13 Agustus 2021

Konsultan,

Sudarlin, M.Si.
NIP. 19850611 201503 1 002

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Dengan menyebut nama Allah Yang Maha Pengasih lagi Maha Penyayang, saya bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Esty Yuniarningsih

NIM : 16630017

Program Studi : Kimia

Fakultas : Sains dan Teknologi

menyatakan dengan sesungguhnya skripsi saya ini adalah asli hasil karya atau penelitian penulis sendiri dan bukan plagiasi dari hasil karya orang lain kecuali pada bagian yang dirujuki sumbernya.

Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya agar dapat diketahui oleh anggota dewan pengaji.

Yogyakarta, 22 Juli 2021

Yang menyatakan,



Esty Yuniarningsih
NIM. 16630017

PENGESAHAN TUGAS AKHIR



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
 Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-1570/Un.02/DST/PP.00.9/08/2021

Tugas Akhir dengan judul :

STUDI KOMPUTASI SINTESIS (5-ALIL-2,3-DIMETOKSIFENIL)-BENZOFENON
DARI SENYAWA METIL EUGENOL DAN UJI TEORITIKNYA SEBAGAI
SENYAWA TABIR SURYA MENGGUNAKAN METODE DFT-B3LYP

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama	:	ESTY YUNIARNINGSIH
Nomor Induk Mahasiswa	:	16630017
Telah diujikan pada	:	Jumat, 06 Agustus 2021
Nilai ujian Tugas Akhir	:	A-

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 6122ze41acdf



Pengaji I

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 612361e92d4f



Pengaji II

Sudarlin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 61210mac69538



Yogyakarta, 06 Agustus 2021
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 612460ebfb72cf

HALAMAN MOTTO

"Hope For The Best but Prepare For The Worst "

(Benjamin Disraeli)



HALAMAN PERSEMBAHAN

*Skripsi ini saya persembahkan untuk
Almamater Program Studi Kimia
UIN Sunan Kalijaga*



KATA PENGANTAR

Segala puji bagi Allah SWT yang telah memberi kesempatan dan kekuatan sehingga skripsi yang berjudul “Studi Komputasi Sintesis (5-Alil-2,3-Dimetoksifenil)-Benzofenon Dari Senyawa Metil Eugenol dan Uji Teoritiknya Sebagai Senyawa Tabir Surya Menggunakan Metode DFT-B3LYP” ini dapat diselesaikan sebagai salah satu persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia.

Penyusun mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan dorongan, semangat, dan masukan-masukan sehingga tahap demi tahap penyusunan skripsi dapat terselesaikan. Ucapan terima kasih tersebut secara khusus disampaikan kepada:

1. Bapak Prof. Dr. Phil. Al Makin, S.Ag., M.A. selaku Rektor Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Dr. Hj. Khurul Wardati, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Dr. Imelda Fajriati, M.Si., selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta.
4. Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang sudah sangat membantu dari tahap awal penelitian hingga penulisan skripsi ini selesai serta selalu memberikan motivasi sejak masa perkuliahan hingga sekarang.
5. Bapak Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc. selaku dosen validator yang telah membantu dan memberikan masukan untuk instrumen penelitian dalam skripsi ini.
6. Bapak Karmanto, S.Si., M.Sc. selaku Kepala Laboratorium Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta dan seluruh PLP Laboratorium Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah banyak membantu dan menyemangati dalam proses penelitian.
7. Bapak, Ibu dan seluruh keluarga yang selalu menyemangati semaksimal mungkin, membantu, mendorong dan tidak pernah lupa untuk selalu mendoakan selama proses penyusunan skripsi ini.

8. Fauziah dan Pipit sebagai teman baik dan partner penelitian yang memiliki dosen pembimbing sama yang selama ini saling berbagi semangat dan motivasi.
9. Mas Hidayatullah Putra Hutasoit dan Mba Syafriyanti Annur selaku kakak tingkat yang selalu berbaik hati memberikan bantuan selama perkuliahan dan selama proses penulisan skripsi ini.
10. Para sahabat, teman-teman kimia angkatan 2016, keluarga besar Himpunan Mahasiswa Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta dan rekan-rekan kimia lintas angkatan yang tidak dapat disebutkan satu persatu yang selalu membantu proses studi dan mendukung proses penulisan.

Demi kesempurnaan skripsi ini, kritik dan saran sangat penulis harapkan.

Penyusun berharap skripsi ini bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan secara umum dan kimia secara khusus.

Yogyakarta, 24 Juli 2021



Esty Yuniarningsih

NIM. 16630017



DAFTAR ISI

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	ii
NOTA DINAS KONSULTAN	iii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	v
PENGESAHAN TUGAS AKHIR	vi
HALAMAN MOTTO	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR TABEL.....	xiv
ABSTRAK	xiv
ABSTRACT.....	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah	4
C. Rumusan Masalah.....	4
D. Tujuan Penelitian	5
E. Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	6
A. Tinjauan Pustaka.....	6
B. Landasan teori.....	8
1. Tabir Surya.....	8
2. Benzofenon dan Turunannya.....	10
3. Reaksi Asilasi Friedel-Crafts.....	11
4. Metode Kimia Komputasi Density Functional Theory (DFT) dan Time-Dependent Density Functional Theory (TD-DFT).....	12
C. Hipotesis Penelitian	16
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	17
A. Waktu dan Tempat Penelitian	17
B. Alat-alat Penelitian.....	17
C. Rancangan Penelitian.....	17
D. Cara Kerja Penelitian	18
BAB IV PEMBAHASAN	20
A. Optimasi Geometri.....	20
B. Usulan Jalur Sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon dari Metil Eugenol dan Benzoil Klorida	23
C. Kemampuan Serapan Daerah UV dari Senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon.....	31
BAB V KESIMPULAN	34
A. Kesimpulan	34
B. Saran	35

DAFTAR PUSTAKA	36
LAMPIRAN	41



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1. Struktur Benzofenon (Dilling, 1996).....	10
Gambar 2. 2. Reaksi Asilasi Friedel-Crafts.....	12
Gambar 3. 1. (a) Metileugenol (ME) ; (b) Benzoil klorida (BCl) ; (c) Kation Benzoil ; (d) Intermediet ; dan (e) (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon (523-DBZF).....	18
Gambar 4. 1. Struktur teroptimasi senyawa (a) Metil Eugenol (ME); (b) Benzoil Klorida; (c) Kation Benzoil; (d) AlCl_3 ; (e) (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon (523-DBZF); dan (f) HCl.....	21
Gambar 4. 2. Struktur Senyawa (a) Metil Eugenol (ME) dan (b) (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon (523-DBZF).....	21
Gambar 4. 3. Mekanisme Reaksi; (a) Sintesis Asam 4-Benzoiloksisinamat (Sagitaras, 2019), (b) Sintesis Benzoil Eugenol (Ramdani, 2011).....	25
Gambar 4. 4. Proses Asilasi Friedel-Craft Sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon (Kenneppohl, 2020).....	27
Gambar 4. 5. Visualisasi Rapatan Senyawa (a) Metil Eugenol (ME) ; dan (b) (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon (523-DBZF).....	30
Gambar 4. 6. Spektra Serapan UV Senyawa 523-DBZF.....	32



DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1. Filter UV Organik (<i>Chemical Absorber</i>) (Latha, 2013).....	9
Tabel 4. 1. Panjang Ikatan dan Sudut Ikatan Hasil Optimasi Geometri.....	22
Tabel 4. 2. Hasil Perhitungan Energi Entalpi Jalur Sintesis.....	26
Tabel 4. 3. Hasil Perhitungan Sifat Elektronik Senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon.....	29
Tabel 4. 4. Panjang Gelombang (λ) dan Kekuatan Osilator.....	32



ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI JALUR SINTESIS (5-ALIL-2,3-DIMETOKSIFENIL)-BENZOFENON DARI SENYAWA METIL EUGENOL DAN UJI TEORITIKNYA SEBAGAI SENYAWA TABIR SURYA MENGGUNAKAN METODE DFT-B3LYP

Oleh:
Esty Yuniarningsih
NIM. 16630017

Pada penelitian ini telah dilakukan studi komputasi mengenai jalur sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon (523-DBZF) dari metil eugenol dan benzoil klorida, serta kemampuan dari senyawa 523-DBZF dalam menyerap sinar UV untuk digunakan sebagai tabir surya. Pendekatan komputasi dilakukan menggunakan metode DFT/B3LYP (Teori Kerapatan Fungsional) dan TD-DFT dengan set basis 6-31G(d). Metode DFT/B3LYP digunakan untuk mengetahui jalur sintesis 523-DBZF dari metil eugenol berdasarkan parameter energi entalpi, dan sifat elektroniknya (momen dipol, HOMO-LUMO dan visualisasi kerapatan elektron). Sementara metode TD-DFT digunakan untuk mengetahui kemampuan senyawa 523-DBZF dalam menyerap sinar UV. Berdasarkan jalur sintesis 523-DBZF dari metil eugenol dan benzoil klorida hasil perhitungan komputasi menggunakan metode DFT/B3LYP yang diusulkan, diketahui bahwa reaksi yang terjadi bersifat endotermik. Hal tersebut ditunjukkan dari nilai entalpi produk yang lebih besar daripada reaktannya dan nilai ΔH reaksi yang cukup tinggi yaitu sebesar 801,9540916 kJ/mol sehingga reaksi dapat berlangsung namun relatif kurang efisien karena reaksinya memerlukan suhu yang tinggi. Selain itu berdasarkan sifat elektroniknya diketahui 523-DBZF bersifat kurang stabil dan lebih reaktif daripada reaktannya. Hasil serapan UV berdasarkan perhitungan komputasi dengan metode TD-DFT menunjukkan bahwa senyawa 523-DBZF memiliki serapan maksimum pada panjang gelombang 286,74 nm dengan intensitas penyerapan sebesar 0,1090. Hal ini menunjukkan bahwa senyawa 523-DBZF berpotensi untuk digunakan sebagai tabir surya tipe filter UV-B.

Kata Kunci. Metil Eugenol, (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon, DFT/B3LYP, TD-DFT, Energi Entalpi, Filter UV.

ABSTRACT

A computational study has been carried out for the synthesis pathway (5-allyl-2,3-dimethoxyphenyl)-benzophenone (523-DBZF) from methyl eugenol and benzoyl chloride, as well as the ability of compound 523-DBZF to absorb UV light for use as a sunscreen. The computational approach was carried out using the DFT/B3LYP (Functional Density Theory) and TD-DFT methods with a base set of 6-31G(d). The DFT/B3LYP method was used to determine the 523-DBZF synthesis pathway from methyl eugenol based on the enthalpy energy parameters, and its electronic properties (dipole moment, HOMO-LUMO and electron density visualization). Meanwhile, the TD-DFT method was used to determine the ability of the 523-DBZF compound to absorb UV light. Based on the synthesis pathway of 523-DBZF from methyl eugenol and benzoyl chloride calculated using the proposed DFT/B3LYP method, it is known that the reaction is endothermic. This is indicated by the enthalpy value of the products which is greater than the reactants and the high ΔH value of the reaction, which is 801.9540916 kJ/mol so that the reaction can take place but is relatively inefficient because the reaction requires a high temperature. In addition, based on its electronic properties, it is known that 523-DBZF is less stable and more reactive than the reactants. The results of UV absorption based on computational calculations using the TD-DFT method showed that the compound 523-DBZF has a maximum absorption at a wavelength of 286.74 nm with an absorption intensity of 0.1090. This indicates that the compound 523-DBZF has the potential to be used as a UV-B filter type sunscreen.

Keywords: Methyl Eugenol, (5-allyl-2,3-dimethoxyphenyl)-benzophenone, DFT/B3LYP, Enthalpy Energy, UV Filter.

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Indonesia merupakan negara tropis yang terletak di sepanjang garis khatulistiwa, oleh karena itu Indonesia memperoleh sinar matahari dengan intensitas cukup tinggi setiap harinya (Handayani, 2012). Hal ini memungkinkan terjadinya paparan radiasi UV (ultraviolet) dan berpotensi menyebabkan kerusakan pada kulit termasuk kanker (Melilia, 2016). Meskipun secara alami tubuh manusia memiliki perlindungan terhadap radiasi UV, tetapi tidak akan efektif untuk melawan efek buruk yang ditimbulkan sehingga perlu adanya perlindungan tambahan seperti tabir surya.

Tabir surya adalah produk topikal dengan kandungan senyawa yang memiliki kemampuan sebagai filter UV yang berfungsi untuk menyerap, memantulkan, atau menyebarkan radiasi sinar serta mencegah sengatan matahari di kulit (Restika, 2017). Menurut Corrêa (2012), salah satu filter UV dalam produk tabir surya yang memiliki kemampuan menyerap radiasi sinar dalam rentang UV-A (320-400 nm) dan UV-B (280-320 nm) adalah turunan benzofenon. Hal tersebut dikarenakan benzofenon menunjukkan kemampuan absorpsi maksimum pada panjang gelombang 288-290 nm dan 325 nm (Kawaguchi, 2018). Beberapa senyawa turunan benzofenon seperti o-hidroksil-benzofenon, o-hidroksil-fenil-hidrazin, o-hidroksil-fenil-triazin merupakan penyerap sinar UV yang sangat baik (Carrol, 2010). Dengan kemampuan tersebut, maka senyawa turunan benzofenon dapat digunakan sebagai senyawa tabir surya.

Secara umum, benzofenon memiliki struktur yang terdiri dari dua cincin aromatik yang dihubungkan oleh atom C karbonil. Adanya cincin aromatik yang terdapat pada senyawa fenolik dapat digunakan untuk mensintesis senyawa turunan benzofenon melalui reaksi asilasi Friedel-Crafts (Ratnawati, 2006), salah satunya senyawa eugenol. Namun reaksi langsung antara eugenol dan benzoil klorida justru akan menghasilkan senyawa ester, karena atom C karbonil dari gugus benzoil yang bersifat elektrofil akan bereaksi dengan gugus -OH dari eugenol (Ramdani, 2011). Oleh sebab itu, gugus -OH perlu dimodifikasi agar elektrofil dapat menyerang pada cincin aromatik untuk menghasilkan senyawa turunan benzofenon. Oleh karena itu, pada penelitian digunakan senyawa metil eugenol yang merupakan salah satu derivat paling sederhana dari eugenol hasil reaksi metilasi gugus hidroksi dari eugenol.

Ratnawati (2010) telah melakukan sintesis senyawa turunan benzofenon dari metil eugenol dan benzoil klorida menggunakan pelarut metilen klorida melalui reaksi asilasi Friedel-Crafts secara eksperimen di laboratorium. Hasil yang diperoleh dari sintesis tersebut adalah senyawa 2,3-dimetoksi-5-(4-fenil-1,3-siklobutadienil)-benzofenon dengan randemen 14,01% dan 2 senyawa isomer yakni (Z)-1-fenil-4-(3,4-dimetoksifenil)but-2-enon dengan randemen 2,23% dan (E)-1-fenil-4-(3,4-dimetoksifenil) but-2-enon dengan 42,88%. Berdasarkan hasil penelitian yang dilaporkan, belum dilakukan penelitian lebih lanjut mengenai bagaimana kemampuan serapan UV dari senyawa turunan benzofenon tersebut. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk mengetahui jalur reaksi sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon dari senyawa metil eugenol dan benzoil

klorida berdasarkan perhitungan komputasi, serta untuk mengetahui kemampuan penyerapan UV dari senyawa turunan benzofenon tersebut untuk digunakan sebagai tabir surya.

Kelebihan dari metode kimia komputasi antara lain dapat membantu untuk membuat desain awal proses reaksi sintesis, melakukan simulasi reaksi, mempelajari mekanisme reaksi, dan menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan (Prianto, 2002). Oleh karena itu, kajian komputasi jalur reaksi sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon dan potensinya sebagai senyawa tabir surya dapat dilakukan dengan metode kimia komputasi. Penelitian ini menggunakan basis set 6-31G(d) dengan metode DFT (*Density Functional Theory*) untuk memperoleh jalur reaksi sintesis dan metode TD-DFT (*Time-Dependent Density Functional Theory*) untuk mengetahui kemampuan serapan UV. Metode DFT dipilih karena pada perhitungannya tidak terpengaruh oleh ukuran sistem dan lebih mudah digunakan. Penggunaan basis set ini dipilih karena cocok dan memiliki keakuratan yang tinggi serta sudah sering digunakan.

Wanita (2020) telah melakukan studi teoritis jalur sintesis asam elagat dari asam galat menggunakan metode DFT/B3LYP basis set 6-31G(d) pada fasa vakum untuk mengoptimasi geometri dan memperoleh nilai energi aktivasi dan energi transisi molekul serta membandingkannya dengan hasil eksperimen dan menghasilkan jalur reaksi sintesis asam elagat terbukti rasional secara teoritik berdasarkan hasil perhitungan komputasi. Metode TD-DFT telah digunakan oleh Ibeji (2016) pada senyawa benzofenon dan turunannya untuk mengetahui

kemampuan serapan sinar UV dan membandingkannya dengan hasil eksperimen dan hasilnya menunjukkan bahwa senyawa benzofenon memiliki serapan pada daerah sinar UV dengan dua tipe transisi yaitu $\pi\rightarrow\pi^*$ dan $n\rightarrow\pi^*$. Dalam penelitian ini metode komputasi yang digunakan didasarkan pada data yang dibutuhkan yaitu energi entalpi, panjang ikatan, energi HOMO-LUMO dan spektra serapan pada daerah UV.

B. Batasan Masalah

1. Metode perhitungan optimasi geometri menggunakan aplikasi Orca 4.2.1 dengan metode DFT/B3LYP dan TD-DFT dengan basis set 6-31G(d).
2. Perhitungan secara komputasi dilakukan pada fasa vakum.
3. Parameter yang digunakan untuk studi komputasi sintesis adalah parameter termodinamika yaitu energi entalpi serta deskriptor elektronik yaitu momen dipol, HOMO-LUMO, dan visualisasi rapatan.
4. Parameter yang digunakan untuk potensi tabir surya adalah kemampuan serapan UV senyawa.

C. Rumusan Masalah

1. Bagaimana sintesis antara metil eugenol dan benzoil klorida dapat berlangsung menghasilkan senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon ditinjau dari parameter besaran termodinamika dan deskriptor elektronik?
2. Bagaimana potensi dari senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon sebagai senyawa tabir surya ditinjau dari kemampuan serapan sinar UV?

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian adalah sebagai berikut:

1. Mengetahui jalur reaksi sintesis senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon dari senyawa metil eugenol dan benzoil klorida berdasarkan parameter energi entalpi.
2. Mengetahui kemampuan serapan UV senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon yang berpotensi untuk digunakan sebagai bahan dasar senyawa tabir surya berdasarkan perhitungan secara komputasi.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat dilakukannya penelitian ini adalah memberikan informasi di bidang kimia komputasi mengenai jalur reaksi sintesis senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon. Manfaat lainnya yaitu dapat memberikan informasi tentang potensi senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon dalam menyerap sinar UV sehingga dapat dikembangkan sebagai produk tabir surya. Diharapkan pula penelitian ini dapat menambah khasanah keilmuan kimia terkait pemodelan senyawa kimia secara komputasi.

BAB V

KESIMPULAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut:

1. Hasil perhitungan jalur sintesis (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon secara komputasi menggunakan metode DFT/B3LYP ditinjau dari parameter termodinamika energi entalpi (ΔH) yang cukup tinggi yaitu sebesar 801,9540916 kJ/mol, hal ini menunjukkan bahwa reaksi bersifat endotermik atau menyerap kalor dan reaksinya membutuhkan suhu yang cukup tinggi sehingga jalur sintesis tersebut relatif kurang efisien. Berdasarkan sifat elektronik ditinjau dari energi dipol, HOMO-LUMO dan visualisasi kerapatan elektron menunjukkan bahwa senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon bersifat kurang stabil dan lebih reaktif daripada reaktannya.
2. Berdasarkan hasil perhitungan secara komputasi dengan metode TD-DFT, senyawa (5-alil-2,3-dimetoksifenil)-benzofenon berpotensi digunakan sebagai tabir surya tipe filter UV-B dengan kemampuan penyerapan gelombang optimum pada λ_{maks} 286,74 nm dan kekuatan absorbansi sebesar 0,109.

B. Saran

Perlu dilakukan studi lebih lanjut di dalam laboratorium melalui eksperimen ataupun secara komputasi dengan menambahkan metode atau parameter-parameter lain seperti energi aktivasi.



DAFTAR PUSTAKA

- Affandi. 2016. Kajian Teoritis Pengaruh Gugus Trifenilamin dan Asam Sianoasetat pada Pelargonidin sebagai Senyawa Pewarna Sel Surya Tersensitasi (DSSC). Program Studi Kimia, UIN Sunan Kalijaga. Yogyakarta.
- Afwa, Ulil I. 2017. Formulasi Krim Tabir Surya dari 2-hidroksi-4-(oktiloksi)benzofenon. Skripsi Fakultas Farmasi, Universitas Muhammadiyah Purwokerto. Purwokerto
- Aidira, Yulia A. A. 2016. Sintesis Metil Eugenol Melalui Eterifikasi Metil Nitrat dengan Eugenol Hasil Isolasi dari Minyak Cengkeh. Skripsi. FMIPA Universitas Sumatera Utara. Medan.
- Alfianto, E. 2015. Implementasi Metode Teori Fungsional Kerapatan Pada Bahasa C untuk Menghitung Energi Keadaan Dasar Berbagai Atom. Elektronik Jurnal Arus Elektro Indonesia. Institut Teknologi Adhi Tama. Surabaya.
- Amanatie. 2014. Buku Pegangan Mahasiswa: Kimia Organik Sintesis. FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta. Yogyakarta.
- Antoniou, C., Kosmadaki, M., Stratigos, A., dan Katsambas, A. 2008. *Sunscreens – What's Important to know*. JEADV, 22; 1110-1119.
- Aribert, N., Camy, S., Lucchese, Y.E., Condoret, J.S. dan Cognet, Patrick. 2010. *Cleaner Routes for Friedel-Crafts Acylation*. International Journal of Chemical Reactor Engineering. Vol.8.
- Barel, A., Paye, M., dan Maibach, H. 2009. *Handbook of Cosmetics Science and Technology*. Third Edition. Uniforma Healthcare USA, Inc: New York.
- Becke, A. D. 2009. *Density Functional Thermochemistry III: The Role of Exact Exchange*. Journal Chemistry Physics, 98: 5648-5652.
- Carrol, G. T., et al. 2010. *Patterning Dewetting in Thin Polymer Films by Spatially Directed Photocrosslinking*. Journal of Colloid and Interface Science, 556-560. New York.
- Corrêa, Bianca A. M., Goncalves, A.S., de Souza, A. M. T., Freitas, C. A., Cabral, L. M., Alburqueque, M. G., Castro, H. C., Santos., E. P., and Rodrigues, C. R. 2012. *Molecular Modeling Studies of the Structural, Electronic, and UV Absorption Properties of Benzophenone Derivatives*. The Journal of Physical Chemistry, 116, 10927-10933. ACS.
- Cramer, 2004. *Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models*. Edisi kedua. John Willey adn Sons. Chichester.

- Damagalad, *et al.* 2013. Formulasi Krim Tabir Surya Ekstrak Kulit Nanas (*Ananas comosus*. Merr) dan Uji In Vitro Nilai Sun Protecting Factor (SPF). *Pharmacon Jurnal Ilmiah Farmasi*, 2(2); 39-43.
- Dilling, W. L. T. 1996. *Journal Organic Chemistry*, 31: 1045-1050.
- Ernzerhof, M. 1999. *Density Functionals: Theory and Applications, Vol. 500 of Lecture Note in Physics*, edited by D. P. Joubert~Springer Verlag, Berlin.
- Fessenden, R.J., dan Fessenden, J.S. 1999. Kimia Organik Edisi Ketiga Jilid 1. Diterjemahkan oleh Pudjaatmaka, A.H. Penerbit Erlangga. Jakarta.
- Fessenden, R.J., dan Fessenden, J.S. 1992. Kimia Organik Jilid 2. Penerbit Erlangga. Jakarta
- Fields, S. W. 2008. *Sunscreen: Mechanisms of Action, Use, adn Excipients*. International Journal of Pharmaceutical Compounding.
- Finnem, M. J. 1987. *Skin Metabolism by Oxidation and Conjugation*. *J. Pharmacol Skin*, Vol 1, 163-169.
- Firdaus, 2014. Kimia Organik Sintesis Bagian dua. FMIPA Universitas Hasanuddin. Makassar.
- Firdaus, R. C. 2018. Sintesis Senyawa 4-dimetilamino Benzalaseton dengan Teknik Grinding dan Uji Aktivitasnya Sebagai Tabir Surya. Skripsi. Fakultas Saintek UIN Sunan Kalijaga. Yogyakarta.
- Gore, P. H. 1964. *Friedel-Crafts and Related Reactions*. G.A. Olah, Wiley Interscience Vol. III. New York.
- Hart, Harold., Craine, Lesi E. dan Hart, David J. 2003. Kimia Organik: Suatu Kuliah Singkat Edisi Keempat. Erlangga. Jakarta.
- Heurung, Ashley R., *et al.* 2014. *Benzophenones*. American Contact Dermatitis Society, Vol. 25. Amerika.
- Ibeji, Collins, dan Okagu, Ogadimma D. 2016. *Nature of Ground State of Benzophenone and Some of its Substituted Derivatives: Experimental and DFT Study*. *Journal of Applied Sciences*, 16: 504-516. Nigeria.
- Jensen, F. 2004. *Introduction to Computational Chemistry*. Wiley & Sons. Chicester.
- Kawaguchi, M. *et al.*, 2008. *Simultaneous analysis of benzophenone sunscreen compounds in water sample by stir bar sorptive extraction with in situ derivatization and thermal desorption–gas chromatography–mass spectrometry*. Departement of analytical chemistry, Faculty of Phamaceutical Sciences, Hoshi University, 2-4-41 Ebara, Shinagawa-ku, Tokyo 142-8501 Japan.

- Kennepohl, D. K., et al. 2020. *Comprehensive Organic Chemistry Experiments for The Laboratory Classroom*. Journal of Royal Society of Chemistry.
- Latha, M., Martis, J., Shinde, R., Bangera, S., and Krishnankutty, B. 2013. *Sunscreening Agent*. Journal of Clinical Aesthetic Dermatology, 6(1); 16-26.
- Lewars, E. G. 2004. *Modeling Marvels, Computational Anticipation of Novel Molecules*. Springer Science Business Media. The Netherlands.
- Melilia, T.F., 2016. Kampanye Pentingnya Menggunakan Sunblock Bagi Kesehatan Kulit Pria dan Wanita Usia 20-25 Tahun Studi Kasus di Kota Bandung. Skripsi. FSRD Universitas Kristen Maranatha. Bandung.
- Mulliken, J.S., Russak, J.E., dan Rigel, D.S. 2012. *The Effect of Sunscreen on Melanoma Risk*. New York University School of Medicine. USA
- Noerdin, Dosli. 1986. Elusidasi Struktur Senyawa Organik dengan Cara Spektroskopi Ultralembayung dan Inframerah. Penerbit Angkasa. Bandung.
- Paulsen, H. & Trautwein, A.X. 2004. *Density Functional Theory Calculations for Spin Crossover Complexes*. Institut fur Physik : Germany.
- Pranowo, Harno Dwi. 2001. Pengantar Kimia Komputasi. Universitas Gadjah Mada Yogyakarta : Yogyakarta.
- Prasetya, A.T., M. Alauhdin, dan Nuni, W. 2010. Simulasi Efektivitas Senyawa Obat Eritromisin F dan Δ6,7 Anhidroeritromisin F dalam Lambung Menggunakan Metode Semiempiris Austin Model 1 (AM1). UNNES : Semarang.
- Pratama, W.A., dan Zulkarnain, A.K. 2015. Uji SPF *In Vitro* dan Sifat Fisik Beberapa Produk Tabir Surya yang Beredar di Pasaran. Majalah Farmaseutik, Vol. 11 No. 1. Fakultas Farmasi Universitas Gadjah Mada. Yogyakarta.
- Prianto, Bayu. 2002. Pemodelan Kimia Komputasi. Peneliti Bidang Material Dirgantara, LAPAN. Jakarta.
- Rahman, A. Z dan Sanjaya, I G. M. 2012. Rasionalisasi Jalur Sintesis Laevifonol dari *trans*-resveratrol dengan Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT). UNESA Journal of Chemistry Vol. 1. Surabaya.
- Ramdani, E. D., 2011. Sintesis Benzoil Eugenol dari Eugenol dan Benzoil Klorida dalam Piridina. Skripsi Fakultas Farmasi. Universitas Sanata Dharma. Yogyakarta.

- Ratnawati, D. 2006. Sintesis Turunan Benzofenon Melalui Reaksi Penataan Ulang Fries dari Senyawa *Para*-Tersier-Butilfenilbenzoat. Jurnal Gradien Vol. 3, No. 1 : 215-218. Bengkulu.
- Ratnawati, D. 2010. Sintesis Metil Eugenol Sebagai Bahan Dasar Pembuatan Turunan Benzofenon yang Berfungsi Sebagai Senyawa Tabir Surya. Jurnal Gradien Vol. 6, 532-536.
- Restika, Eva. 2017. Formulasi dan Penentuan Potensi Tabir Surya dari Krim Ekstrak Metanol Umbi Ubi Kelapa Ungu (*Dioscorea alata var Purpurea*). Skripsi pada Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan UIN Alauddin Makassar.
- Riyanto., Sastrohamidjojo, H., dan Fariyatun, E. 2016. *Synthesis of Methyl Eugenol from Crude Cloves Leaf Oil Using Acid and Based Chemicals Reactions*. IOSR Journal of Applied Chemistry Vol. 9, 105-112.
- Rocca, D., Gebauer, R., De Angelis, F., Nazeeruddin, M.K., Baroni, S., 2009. *Time-Dependent Density Functional Theory Study Of Squaraine Dye-Sensitized Solar Cells*. Chemical Physics Letters 475, 49 –53.
- Rohmah, A. 2018. Sintesis Senyawa 3-4 Dimetoksi Dibenzalaseton dan Uji Aktivitasnya Sebagai Tabir Surya. Skripsi pada Fakultas Saintek UIN Sunan Kalijaga. Yogyakarta.
- Roth, H. J. & Blaschke, G. 1985. *Pharmazeutische Analytic*. Diterjemahkan oleh Sarjono Kisman dan Slamet Ibrahim. 354-355. Universitas Gadjah Mada : Yogyakarta.
- Sagitaras, Ilham B., dkk. 2019. Optimasi Kondisi Sintesis Asam 4-Benzoiloksisinamat Menggunakan Iradiasi Gelombang Mikro. Jurnal Farmasi dan Ilmu Kefarmasian Indonesia Vol. 6.No.1. Universitas Airlangga. Surabaya.
- Sayuti, N. A. 2015. Formulasi dan Uji Stabilitas Fisik Sediaan Gel Ekstrak Daun Ketepeng Cina (*Cassia alata L.*). Jurnal Kefarmasian Indonesia, Vol. 5 No. 2. Poltekkes Kemenkes Surakarta : Surakarta.
- Schalka, S. And Reis, V. 2011. *Sun Protection Factor: Meaning and Controversies*. An Bras Dermatol, 3(86), 507-515.
- Shah, Rutuja S., Rutuja R. Shah, Rajashri B. Pawar, Pranit P. Gayakar. 2015. UV-Visible Spectroscopy-A Review. *International Journal of Institutional Pharmacy and Life Sciences*. Vol. 05, 490-505.
- Sitorus, M. 2007. Spektroskopi (Elusidasi Struktur Molekul Organik). Graha Ilmu. Yogyakarta.

- Solomon, T. W. G., Fryhle, C. B. & Snyder, S. A. 2016. *Organic Chemistry* (12 th Ed). John Wiley and Sons, Inc : New Jersey.
- Sousa, S. F., et al. 2007. *General Performance of Density Functionals*. Journal Physics America, 111: 10439-10452. Portugal
- Stiefel C. Dan Schwack, W. 2015. *Photoprotection in Changing Times – UV Filter Efficacy and Safety, Sensitization Processes and Regalotary Aspects*. International Journal of Cosmetics Science 37: 2-30.
- Tundo, Pietro. 2001. *New Developments in Dimethyl Carbonate Chemistry*. Pure and Applied Chemistry Vol. 37 No. 7. 1117 – 1124.
- Ulfa, T., Priani, S. E., dan Lukmayani, Y. 2016. *Uji Aktivitas Tabir Surya Ekstrak n-Heksan Kulit Buah Manggis (Garcinia mangostana Linn.) Secara In Vitro*. Prosiding Farmasi, 611-617.
- Utomo, M. Pranjoto. 2010. *Green Chemistry* dengan Kimia Katalisis. Prosiding Seminar Nasional Penelitian, Pendidikan dan Penerapan MIPA. FMIPA UNY. Yogyakarta.
- Wanita, Defitiana dan Sanjaya, I Gusti, M. 2020. Studi Komputasi Jalur Sintesis Asam Elagat dari Asam Galat. UNESA Journal of Chemistry Vol. 9, No. 1. Surabaya.
- Yanti, Aprilianti R. Y., dkk. 2018. Formulasi Gel Tabir Surya dari Buah Mahkota Dewa *Phaleria marcocarpa* (Sceff.) Boerl. Laporan Akhir Penelitian Strategis Nasional. Universitas Esa Unggul. Jakarta.
- Young, David. 2001. *Computational Chemistry*. Jhon Wiley & Sons. New York.