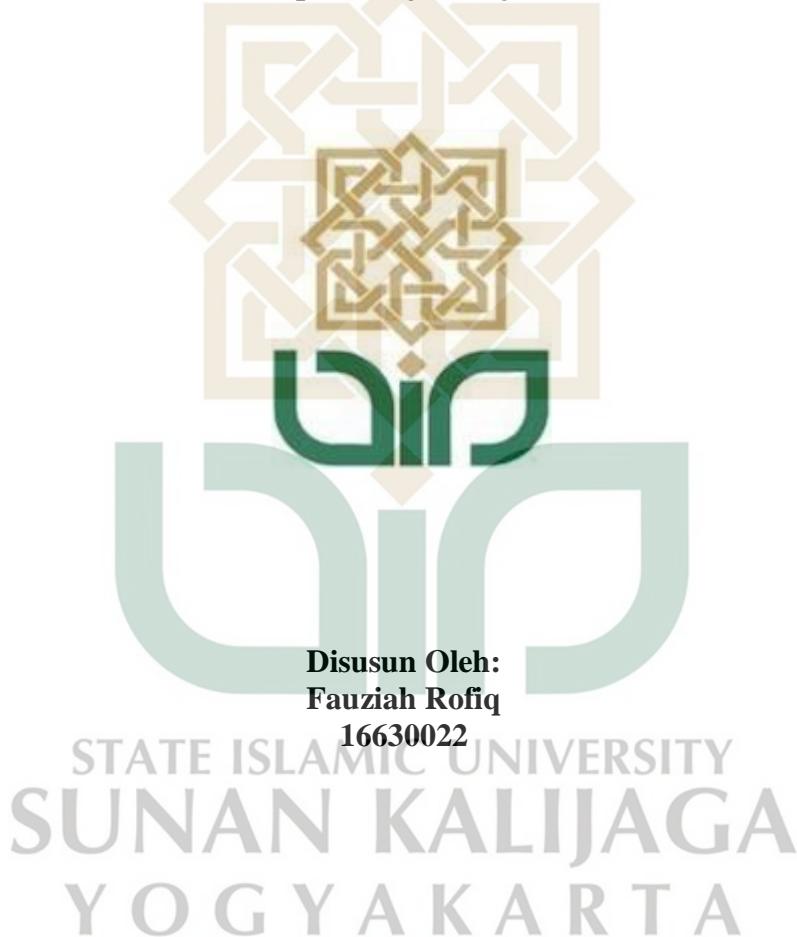


KAJIAN TEORITIS (5-TERSIER-BUTIL-2-METOKSIFENIL)-BENZOFENON SEBAGAI SENYAWA TABIR SURYA DENGAN METODE DFT-B3LYP

Skrripsi

**Untuk memenuhi Sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana S-1**



Disusun Oleh:

Fauziah Rofiq

16630022

**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-UINSK-BM-05-03/R0

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir
Lamp : -

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

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

Nama : Fauziah Rofiq
NIM : 16630022
Judul Skripsi : Kajian teoritis (5-tetra butil-2-metoksifenil)-benzofenon sebagai senyawa tabir surya dengan metode DFT-B3LYP

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam Program Studi Kimia.

Dengan ini kami mengharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 07 juni 2021

Pembimbing

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si
NIP: 19760621 199903 2 005

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/ TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir
Lamp :-

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

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

Nama : Fauziah Rofiq
NIM : 16630022

Judul Skripsi : Kajian Teoritis (5-tetra butil-2-metoksifenil)-Benzofenon sebagai Senyawa Tabir Surya dengan Metode DFT-B3LYP

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

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya kami ucapan terima kasih.
Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 19 Juli 2021
Konsultan


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

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/ TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Lamp :-

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

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

Nama : Fauziah Rofiq
NIM : 16630022

Judul Skripsi : Kajian Teoritis (5-tetra butil-2-metoksifenil)-Benzofenon sebagai Senyawa Tabir Surya dengan Metode DFT-B3LYP

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

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 17 Juli 2021
Konsultan


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

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Fauziah Rofiq
NIM : 16630022
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul “Kajian Teoritis (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-Benzofenon sebagai senyawa tabir surya dengan metode DFT-B3LYP” merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar sarjana di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 21 Juni 2021



Fauziah Rofiq
NIM 16630022

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA



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-1244/Un.02/DST/PP.00.9/07/2021

Tugas Akhir dengan judul : KAJIAN TEORITIS (5-TERSIER-BUTIL-2-METOKSIFENIL)-BENZOFENON SEBAGAI SENYAWA TABIR SURYA DENGAN METODE DFT-B3LYP

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : FAUZIAH ROFIQ
Nomor Induk Mahasiswa : 16630022
Telah diujikan pada : Selasa, 29 Juni 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: 60ecf9a4c0007



Pengaji I

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 60ecf9fda59db



Pengaji II

Sudarlin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 60f52d2caf8ce



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
Yogyakarta, 29 Juni 2021
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi



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

Valid ID: 60fa93b06c036

HALAMAN MOTTO

“Amor Fati”



HALAMAN PERSEMPAHAN

*Skripsi ini saya persembahkan untuk
Almamater Program Studi Kimia
UIN Sunan Kalijaga
dan untuk semua yang berjuang dalam Ilmu Pengetahuan*



KATA PENGATAR

Alhamdulillah, puji syukur senantisa saya panjatkan kepada Allah SWT atas limpahan rahmat dan nikmat-Nya serta taufiq dan hidayah-Nya penulis dapat menyelesaikan penelitian dengan judul "*Kajian Teoritis (5-Tersier-Butil-2-Metoksifenil)-Benzofenon Sebagai Senyawa Tabir Surya dengan Metode DFT-B3LYP*". Shalawat dan salam semoga selalu tercurah kepada Rasulullah Muhammad SAW yang telah berjuang menegakkan Islam. Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan karya ini tidak akan terwujud tanpa adanya bantuan, bimbingan dan dorongan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, dengan kerendahan hati penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada yang terhormat :

1. Kedua Orang Tuaku Bapak Suwardi dan Ibu Sitti Hanifah yang telah memberikan kasih sayang, dukungan, motivasi dan semangat hingga saat ini.
2. Ibu Dr. Hj. Khurul Wardati, M.Si. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Ibu Dr. Imelda Fajriati, M.Si. selaku ketua Program Studi Pendidikan Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta atas bimbingannya selama studi.
4. Ibu Susy Yunita Prabawati, M.Si. selaku Dosen Pembimbing yang telah memberikan waktu, tenaga, dan pikirannya untuk mengarahkan penulis dalam penulisan tugas akhir.
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.
7. Seluruh PLP Laboratorium Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah banyak membantu dan menyemangati dalam proses penelitian.
8. Kakakku, Ahmad Khomaini Fauzan yang telah memberikan dukungan baik secara langsung maupun tidak langsung.
9. Mas Ilu yang telah menemani dan memberikan dukungan selama penulisan skripsi ini.
10. Mas Hidayatuloh Putra Hutasoit yang telah banyak membantu penelitian ini.

Penulis menyadari sepenuhnya bahwa tugas akhir ini jauh dari kesempurnaan karena keterbatasan kemampuan dan pengetahuan penulis. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran yang mendukung dan membangun demi perbaikan dari tugas akhir ini. Akhir kata, penulis berharap agar tugas akhir ini dapat berguna dan bermanfaat bagi kita semua, Aamiin.

Yogyakarta, 21 Juni 2021

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
SURAT PERSETJUAN SKRIPSI/ TUGAS AKHIR.....	ii
SURAT PERSETJUAN SKRIPSI/ TUGAS AKHIR.....	iii
SURAT PERSETJUAN SKRIPSI/ TUGAS AKHIR.....	iv
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI	v
PENGESAHAN TUGAS AKHIR.....	vi
HALAMAN MOTTO.....	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN	viii
KATA PENGATAR	ix
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
INTISARI.....	xiv
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A.Latar Belakang	1
B.Batasan Masalah	3
C.Rumusan Masalah	3
D.Tujuan Penelitian	3
E.Manfaat Penelitian.....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	5
A.Tinjauan Pustaka.....	5
B. Landasan teori	7
1.Senyawa Tabir Surya.....	7
2.Benzofenon dan Turunannya	8
3.Reaksi Asilasi Friedel-Crafts	10
4.Metode Kimia Komputasi.....	11
C.Hipotesis Penelitian	15
BAB III METODE PENELITIAN	16
A.Waktu dan Tempat Penelitian.....	16
B.Alat-alat Penelitian.....	16
C.Rancangan Penelitian	16
D.Cara Kerja Penelitian	16
BAB IV PEMBAHASAN.....	19
A.Optimasi Geometri.....	19
B.Sifat Elektronik	27
C.Serapan Daerah UV	29

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	36
A.Kesimpulan.....	36
B.Saran.....	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	40



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Struktur Senyawa Benzofenon	10
Gambar 2. 2 Jalur retrosintesis Senyawa Benzofenon.....	11
Gambar 2. 3 Reaksi Asilasi Friedel-Crafts	11
Gambar 3.1 (a) 4-tersier-butilfenol (4TBF), (b) tersier-butyl-ammonium bromide,(c) Dimetil karbonat (DMC), (d) Transisi 1, (e) 4-t-butil-metoksifenil (4TBMF), (f) AlCl ₃ , (g) Benzoil klorida (BCl), (h) Transisi 2, (i) (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon (5TBMFB).....	17
Gambar 4. 1 Energi Optimasi.....	24
Gambar 4. 3 Proses Metilasi	25
Gambar 4. 4 Proses Asilasi Friedel-Craft	25
Gambar 4. 5 HOMO-LUMO.....	27
Gambar 4. 6 Transisi Elektron	28
Gambar 4. 7 Spektra Serapan UV	30



DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Struktur Teroptimasi	19
Tabel 4. 2 Nilai Elektronegativitas	22
Tabel 4. 3 Panjang Ikatan	23
Tabel 4. 4 Jenis-jenis Transisi	29



KAJIAN TEORITIS (5-TERSIER-BUTIL-2-METOKSIFENIL)-BENZOFENON SEBAGAI SENYAWA TABIR SURYA DENGAN METODE DFT/TD-DFT

Oleh:

**FAUZIAH ROFIQ
16630022**

INTISARI

Kajian komputasi telah dilakukan untuk mengkaji senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon (5TBMFB) sebagai tabir surya. Penelitian menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*) yang dan TD-DFT (*Time Dependent-Density Functional Theory*) basis set B3LYP/6-31G(d) menggunakan perangkat lunak *ORCA*. DFT merupakan metode untuk menghitung total energi elektronik dan distribusi kerapatan elektron suatu senyawa dan TD-DFT merupakan metode untuk menyelidiki sifat optik serta sifat elektrokimianya. Perhitungan energi optimasi pada reaksi metilasi 4-tersier-butilfenol (4TBF) dengan gugus metil dari dimetil karbonat yang dilanjutkan reaksi asilasi Friedel-Crafts dengan benzoil klorida, panjang ikatan, energi HOMO-LUMO, dan serapan pada daerah UV. Hasil yang diperoleh berdasarkan energi optimasi (DFT) bahwa 4TBF yang mengalami reaksi metilasi menghasilkan struktur yang lebih stabil, dan panjang ikatan yang dihasilkan menunjukkan dapat berikatan dengan benzoil klorida melalui reaksi asilasi Friedel-crafts. Sedangkan, TD-DFT menghasilkan selisih energi HOMO-LUMO sebesar 4,26 eV dan memiliki serapan optimum pada 264-301 nm pada daerah UV-B.

Kata kunci: Tabir surya, Benzofenon, Asilasi Friedel-Crafts, DFT, TD-DFT

ABSTRACT

Computational studies have been carried out to (5-tertiary-butyl-2-methoxyphenyl)-benzophenone (5TBMFB) as a sunscreen. The research uses the DFT (Density Functional Theory) and TD-DFT (Time Dependent-Density Functional Theory) basis set B3LYP/6-31G(d) using ORCA software. DFT is a method to calculate the total electronic energy and electron density distribution of compounds and TD-DFT is a method to investigate its optical and electrochemical properties. Calculations include the optimization energy in the 4-tert-butylphenol (4TBF) methylation reaction with the methyl group of dimethyl carbonate were continued Friedel-Crafts acylation reaction with benzoyl chloride, bond length, HOMO-LUMO energy, and absorption in the UV region. The results obtained based on energy optimization (DFT) that 4TBF through methylation reaction to generate more stable structure, and the resulting bond length shows that it can bind to benzoyl chloride through the Friedel-Crafts acylation reaction. Meanwhile, TD-DFT produces a HOMO-LUMO energy difference of 4.26 eV and has an optimum absorption at 264-301 nm in the UV-B region.

Keywords: Sunscreens, Benzophenone, Acylation Friedel-Crafts, DFT, TD-DFT



BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Paparan sinar matahari dapat dirasakan setiap hari di sepanjang tahun di negara beriklim tropis termasuk Indonesia. Perlindungan terhadap paparan sinar ultraviolet (UV) yang berlebihan adalah salah satu tindakan pencegahan untuk mengurangi risiko kanker kulit (American Cancer Society, 2016). Dengan meningkatnya kesadaran akan bahaya paparan sinar matahari yang berlebihan, permintaan pasar akan tabir surya semakin besar.

Tabir surya adalah bahan kimia yang dapat menyerap, menyebarluaskan, atau memantulkan sinar UV dalam rentang panjang gelombang UVA 320-400 nm dan UVB 290-320 nm (Morabito *et al.*, 2011). Tabir surya adalah tambahan untuk pakaian dan sarana fisik lainnya dari perlindungan radiasi UV matahari (CDC, 2018). Tabir surya menurut mekanisme kerjanya terbagi menjadi dua jenis yaitu tabir surya kimia dan tabir surya fisik. Tabir surya fisik bekerja dengan cara memantulkan sinar, contohnya titanium dioksida dan seng oksida. Tabir surya kimia bekerja dengan cara mengabsorpsi energi radiasi contohnya antranilat, kalkon, dan benzofenon (Wasitaatmadja, 1997).

Benzofenon merupakan senyawa keton aromatik yang terdiri dua cincin benzen dengan gugus karbonil. Benzofenon biasanya diproduksi dari benzen dengan karbonil klorida melalui Friedel-Crafts dengan katalis logam (Siegel, 2012). Benzofenon menunjukkan absorpsi maksimum pada panjang gelombang 288–290 dan 325 nm (Kawaguchi, 2018). Secara umum, senyawa turunan benzofenon dapat digunakan sebagai penyerap sinar UV seperti *oxybenzone* dan *dioxybenzone*.

Benzofenon dapat disintesis salah satunya menggunakan bahan fenol (Ratnawati, 2005)

Penelitian tentang suatu senyawa dapat dilakukan secara teoritik dan eksperimen. Penelitian secara teoritik salah satunya melalui metode komputasi. Metode kimia komputasi memungkinkan para kimiawan melakukan penentuan struktur dan sifat suatu sistem kimia dengan cepat (Pranowo, 2003). Metode komputasi yang digunakan dalam penelitian ini adalah DFT (*Density Functional Theory*) dan TD-DFT (*Time Dependent-Density Functional Theory*). Correa (2012) telah menganalisis senyawa turunan benzofenon yaitu *benzophenone-3* sebagai UV-*filters* menggunakan metode DFT/B3LYP basis set 6-31G(d) pada fasa vakum untuk mengoptimasi geometri dan TD-DFT menghasilkan serapan pada 285 dan 325 nm serta membandingkan dengan metode eksperimen dan menghasilkan serapan 287 dan 325 nm.

Kajian struktur senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon sebagai senyawa tabir surya dilakukan dengan metode komputasi dengan menerapkan beberapa dasar dari hasil eksperimen yang telah dilakukan oleh peneliti sebelumnya. Seperti bahan dasar, katalis, dan reaksi yang digunakan. Parameter yang diperoleh berupa total energi optimasi, panjang ikatan, energi HOMO-LUMO, dan serapan pada daerah UV. Berdasarkan parameter-parameter tersebut maka dapat diketahui reaksi pembentukan dan sifat senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon sebagai senyawa tabir surya melalui permodelan komputasi.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Metode perhitungan optimasi geometri menggunakan *ORCA* dengan metode DFT-B3LYP basis set 6-31G(d) dan keadaan tereksitasi dari senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon.
2. Perhitungan dilakukan pada fasa vakum.
3. Parameter yang digunakan total energi optimasi, panjang ikatan, serapan pada daerah Ultraviolet.

C. Rumusan Masalah

Rumusan masalah pada penelitian ini adalah :

1. Apakah proses metilasi pada 4-tersier-butilfenol dan asilasi Friedel-Crafts pada 4-tersier-butil-metoksifenil dapat menghasilkan senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-Benzofenon berdasarkan energi total dan panjang ikatan?
2. Bagaimana karakteristik senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-Benzofenon sebagai tabir surya berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO dan serapan maksimum daerah ultraviolet?

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian adalah sebagai berikut:

1. Menentukan proses metilasi pada 4-tersier-butilfenol dan asilasi Friedel-4-tersier-butil-metoksifenil sehingga dapat menghasilkan senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-Benzofenon berdasarkan total energi optimasi dan panjang ikatan?

2. Menentukan karakteristik senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-Benzofenon sebagai tabir surya berdasarkan parameter energi HOMO-LUMO dan serapan maksimum daerah ultraviolet?

E. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah menghasilkan referensi teoritik mengenai modifikasi senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon serta potensinya sebagai senyawa tabir surya.



BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan maka dapat disimpulkan bahwa:

1. Senyawa 4-butilfenol memiliki kestabilan yang lebih rendah dibandingkan dengan senyawa 4-tersier-metoksifenil karena adanya pengaruh penambahan gugus metil dari agen pemetalasi dimetil karbonat. Kestabilan senyawa ditinjau dari energi optimasi, dimana *4-tersier*-metoksifenil memiliki total energi optimasi yang lebih rendah dari 4-butilfenol yaitu ΔE 103042,01 kj/mol. Selain itu, juga memiliki elektronegativitas dan panjang ikatan yang optimum untuk dapat berikatan melalui reaksi asilasi Friedel-Crafts membentuk (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon.
2. Senyawa (5-tersier-butil-2-metoksifenil)-benzofenon memiliki energi HOMO-LUMO 4,716 eV pada jenis eksitasi elektron HOMO-2-LUMO dengan serapan gelombang UV optimum λ 264,23 nm dan 301,24 nm dapat digunakan sebagai tabir surya pada daerah UV-B.

B. Saran

Perlu diadakan studi lebih lanjut melalui didalam laboratorium melalui eksperimen ataupun secara komputasi dengan menambahkan parameter parameter lain.

DAFTAR PUSTAKA

- Adam S. Aldahan, *et al.*, 2015. *The History of Sunscreen*. JAMA Dermatology. Volume 151-12.
- American Cancer Society, 2016. *Melanoma Skin Cancer*. <https://www.cancer.org/cancer/melanoma-skin-cancer.html>. Diakses tanggal 2 juni 2021
- Akbar, Bio Insan. 2013. *Studi Komputasi Senyawa Dopamine dan Metil Katekol sebagai Dye untuk Aplikasi Dye Sensitized Solar Cell: "Software Benchmarking"*.
- Alebeid, O. K., & Zhao, T. 2017. *Review on: Developing UV protection for cotton fabric*. The Journal of the Textile Institute, 108(12), 2027–2039. doi:10.1080/00405000.2017.1311201
- Apriliani, Annisa Tria. 2017. *Studi Komputasi Sifat Elektronik Senyawa Turunan Carbazole sebagai Sensitizer pada Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)*.
- Bachrach, Steven M., 2007. *Computational Organic Chemistry*. England: Jhon Wiley and Sons.
- Bianca A. M. Correa et al., 2012. *Molecular Modeling Studies of the Structural, Electronic, and UV Absorption Properties of Benzophenone Derivatives*. CCS, Faculty of Pharmacy, ModMolQSAR, Federal University of Rio de Janeiro (UFRJ), 21941-590 Rio de Janeiro, RJ, Brazil.
- Budavari, 1989. The Merk Index, eleventh edition, Merk&Co.inc., Rahway, N.J., USA, 9.
- Carroll, G. T., Turro, N. J., & Koberstein, J. T. (2010). *Patterning dewetting in thin polymer films by spatially directed photocrosslinking*. Journal of Colloid and Interface Science, 351(2), 556–560. doi:10.1016/j.jcis.2010.07.070
- Centers for Disease Control and Prevention (CDC), 2018. Skin Cancer: Sun Safety. available at: https://www.cdc.gov/cancer/skin/basic_info/sun-safety.htm. Diakses tanggal 2 juni 2021
- Cheshmedzhieva, D., Ilieva, S., Hadjieva, B. & Galabov, B. 2008. *The mechanism of alkaline hydrolysis of amides: a comparative computational and experimental study of hydrolysis of N-methylacetamide, N-methylbenzamide, and acetanilide*. Journal of Physical Organic Chemistry, 22 (2008): 619-631
- Desimone II, E.M. 2000. *Prevention of Sun-Induced Skin Disorders*. In *Hanbook of Nonprescription Drugs (12th)*. American Pharmaceutica Association. Washington DC.

- Departemen Kesehatan RI. *Formularium Kosmetika Indonesia (Cetakan I)*. Jakarta: Departemen Kesehatan RI. 1985.
- Fessenden dan Fessenden. 1999. *Kimia Organik Jilid 3*. Edisi Ketiga. Jakarta: Erlangga
- Finklea G. *Pre-Sunscreen Methods for Dealing with the Sun*. Mental Floss website. 2015. <http://mentalfloss.com/article/64312/10-pre-sunscreen-methods-dealing-sun>. Diakses Maret 25, 2021.
- Huang, W., Hou, B., Liu, M., & Li, Z. (2005). Improvement in tribological performances of magnesium alloy using amide compounds as lubricating additives during sliding. *Tribology Letters*, 18(4), 445–451. doi:10.1007/s11249-004-3596-z
- Idris, Firdaus. 2012. *Studi Komputasi Senyawa Organik Indole Phenyl dan Carbazole Phenyl dengan Penambahan*.
- James W. Young, Jan Baggers, and Steve A. Soergel. 1993. *High-Dose UV-B Radiation Alters Human Dendritic Cell Costimulatory Activity but Does Not Allow Dendritic Cells to Tolerize T Lymphocytes to Alloantigen In Vitro*. *Blood*, Vo l81, No1: pp 2987-2997
- Jerry L. Reddinger, John R. Reynolds. Molecular Engineering of π - Conjugated Polymers. https://doi.org/10.1007/3-540-70733-6_2
- Lavi, Novita. Tabir Surya Bagi Pelaku Wisata. Universitas Udayana: Denpasar. 2013.
- Lewars, Errol. 2004. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Boston, MA: Springer US.
- Lissel et al., 1986. *Dimethylcarbonate as A Methylation Agent under Phase-Transfer-Catalyst Conditions*. Faculty of Chemistry University of Bielefeld 25, D-4800 Bielfeld, Deutschland.
- Male, Y.; Sutapa, I. W.; Ranglalin, O. *Computational Study Natural Color Essence (Dyes) As Active Material on Organic Solar Cell with Density Functional Theory (DFT)*. Indo. J. Chem. Res. 2015, 2, 205-212.
- Material Data Sheet by Fisher. <https://fscimage.fishersci.com/msds/02740.htm>. Diakses 25 April 2020
- Michael P. Harold, Balamurali Nair, Gregor Kolios. 2003. *Hydrogen generation in a Pd membrane fuel processor: assessment of methanol-based reaction systems*. Chemical Engineering Science, Volume 58, Issue 12 Pages 2551-2571, ISSN 0009-2509.
- Migaku Kawaguchi et al., 2008. *Simultaneous analysis of benzophenone sunscreen compounds in water sample by stir bar sorptive extraction within situ derivatization and thermal desorption-gas chromatography-mass spectrometry*. Departement of analytical

chemistry, Faculty of Pharmaceutical Sciences. Hoshi University, 2-4-41 Ebara, Shinagawa-ku, Tokyo 142-8501 Japan.

- Morabito, N.C.K. Shapley, K. G. Steeley, A. Tripathi. 2011. *Review of Sunscreen and The Emergence of Non-Conventional Absorbers an Their Applications in Ultraviolet Protection.* International Journal of Cosmetic Science Volume 33, Issue 5 p. 385-390
- Mulliken, R. S. (1934). *A New Electroaffinity Scale; Together with Data on Valence States and on Valence Ionization Potentials and Electron Affinities.* J. Chem. Phys.. 2: 782–793
- Muryanto, St dan Hadi, S.D. 2006. *Mengintegrasikan Green Chemistry Kedalam Program Studi S1 Bidang Sains Dan Teknik.* Proceeding. Universitas Negeri Semarang. Semarang.
- Pranowo, H., 2011. *Pengantar Kimia Komputasi.* Austrian Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC). Jurusan Kimia Fakultas MIPA UGM Yogyakarta.
- Paulsen, H. dan A.X. Trautwein. *Calculation of The Electronic Energy Differences of Spin Crossover Complexes.*
- Paul T . Anastas, et al., 2002. *The role of catalysis in the design, development, and implementation of green chemistry.* Office of Pollution Prevention and Toxic, U.S Environmental Protection Agency. Mail code 7406, 401 M Street S.W., Washington, DC 20460, USA. Catalysis Today 55 (2000) 11-22.
- Pranowo, Harno Dwi. 2010. *Pengantar Kimia Komputasi.* Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC). Jurusan Kimia Fakultas MIPA Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta.
- Ramachandran, K. I., Deepa, Gopakumar, Namboori, and Krishnan, 2008. *Computational Chemistry and Molecular Modeling,* Springer: Coimbatore, India.
- Ratnawati, Devi. 2006. *Sintesis Turunan Benzofenon Melalui Reaksi Penataan Ulang Fries Dari Senyawa Para-Tersier-Butilfenilbenzoat.* Jurusan Kimia, Universitas Bengkulu, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam. Jurnal Gradien, Vol 3, 215-218
- Ratnawati, Devi. 2010. *Sintesis Metil Eugenol Sebagai Bahan Dasar Pembuatan Turunan Benzofenon Yang Berfungsi Sebagai Tabir Surya.* Jurusan Kimia, Universitas Bengkulu, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam. Jurnal Gradien, Vol 6, 532-536.
- Roth, H. J. and Blaschke, G., 1981. *Pharmazeutische Analitycs.* diterjemahkan oleh Sarjono Kisman dan Slamet Ibrahim, 354-355, Gadjah Mada University Press, Yogyakarta.
- Runge, Erich dan E.K.U. Gross. *Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems.* Physical Review Letters, Vol. 52

- Sanjaya, Ali Fadhli Indra. 2012. *Studi Komputasi Senyawa N-Carbazole-PhOMe, N-Indole-PhOMe, N-Indoline- PhOMe sebagai Sensitizer pada Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) menggunakan Density Functional Theory (DFT) dan Time Dependent Density Functional Theory (TDDFT) dalam Fasa Gas dan Pelarut Toluene*.
- Semedy Ouk, et al. 2002. *O-Methylation of Phenolic Compounds Dimethyl Carbonate under Solid/Liquid Phase Transfer System*. 31077 Toulouse Cedex, France: Tetrahedron Letters 43 2661-2663.
- Siegel, Hardo; Eggersdorfer, Manfred. 2012. *Ketones*. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Weinheim: Wiley VCH. doi:10.1002/14356007.a15_077.
- Sastrohamidjojo, Hardjono. 1991. *Dasar-Dasar Spektroskopi*. UGM-press
- Suhartati, Tati. 2017. *Dasar-Dasar Spektrofotometri UV-Vis dan Spektrometri Massa untuk Penentuan Struktur Senyawa Organik*. AURA CV. Anugrah Utama Raharja Anggota IKAPI No.003/LPU/2013.
- Suharty, Neng Sri. 2002. *Sintesis Senyawa Antioksidan Penyerap Sinar UV 2-Hidroksi-4-(β-akrilat-etoksi)-benzofenon (HAEB)*. Jurusan Kimia FMIPA, Universitas Sebelas Maret Surakarta.
- Tahir, Iqmal. Karna Wijaya, Iip Izul Falah, Rahma Damayanti. 2004. *Pemodelan Molekul Senyawa Mycosporine-Like Amino Acids (Maas-Like) Sebagai Senyawa Penyerap Sinar UV*. Jurusan Kimia, FMIPA, Universitas Gadjah Mada.
- Tolga N.V. Karsili. et al. 2014. *Ab Initio Study of Potensial Ultrafast Internal Conversion Routes in Oxybenzone, Caffeic Acid, and Ferulic Acid: Implications for Sunscreens*. The Journal of Physical Chemistry.
- Tundo, P., 2001. *New Developments in Dimethyl Carbonate chemistry*. Pure & Appl. Chem., 73 (7), 1117-1124
- Wasitaatmadja, M, S. 1997. *Penuntun Ilmu Kosmetik Medik*, UI Press: Jakarta
- Weiguang Chen, Hengbo Yin, Yunsheng Zhang, Zhangzhun Lu, Aili Wang, Yutang Shen, Tingshun Jiang, Longbao Yu. 2010. *Acylation of salicylamide to 5-acetylsalicylamide using ionic liquids as dual catalyst and solvent*. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Volume 16, Issue 5, Pages 800-804, ISSN 1226-086X.