ANALISIS KOMPUTASI DERIVAT ASAM FERULAT BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT) SEBAGAI MATERIAL AKTIF TABIR SURYA

APRI WAHYUDI
H1031211007

SKRIPSI

PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
PONTIANAK
2025

ANALISIS KOMPUTASI DERIVAT ASAM FERULAT BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT) SEBAGAI MATERIAL AKTIF TABIR SURYA

APRI WAHYUDI

H1031211007

Skripsi
Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains pada Program Studi Kimia

PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
PONTIANAK
2025

LEMBAR PENGESAHAN

Judul Tugas Akhir	: Analisis Komputasi Derivat Asam Ferulat Berbasis *Density Functional Theory* (Dft) sebagai Material Aktif Tabir Surya
Nama Mahasiswa	: Apri Wahyudi
NIM	: H1031211007
Jurusan/Program Studi	: Kimia/S1-Kimia
Tanggal Lulus	: 23 Mei 2025
SK Pembimbing	: Nomor 617/UN22.8/TD.06/2025 - 26 Februari 2025
SK Penguji	: Nomor 899/UN22.8/TD.06/2025 - 18 Maret 2025

Dosen Pembimbing

Pembimbing I	Pembimbing II
Berlian Sitorus, S.Si., M.Si., M.Sc., Ph.D.	Dr. Ihsanul Arief, S.Si., M.Sc.
NIP 197410102000122006	NUPTK 8644766667131052

Dosen Penguji

Ketua Penguji	Anggota Penguji
Dr. Ari Widiyantoro, S.Si, M.Si.	Dr. Endah Sayekti, S.Si, M.Si.
NIP 197304012000121001	NIP 197206222000122001
Pimpinan Sidang	Sekretaris Sidang
(merangkap anggota penguji)	(merangkap anggota penguji)
Berlian Sitorus, S.Si., M.Si., M.Sc., Ph.D.	Dr. Ihsanul Arief, S.Si., M.Sc.
NIP 197410102000122006	NUPTK 8644766667131052

Mengesahkan
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Tanjungpura

Prof. Dr. Gusrizal, S.Si., M.Si.
NIP 197108022000031001

PERNYATAAN INTEGRITAS AKADEMIK

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama	: Apri Wahyudi
NIM	: H1031211007
Program Studi/Jurusan	: Kimia/S1-Kimia
Fakultas	: MIPA

Dengan ini menyatakan bahwa dokumen ilmiah Tugas Akhir yang disajikan ini tidak mengandung unsur pelanggaran integritas akademik sesuai Peraturan Menteri Pendidikan, Kebudayaan, Riset, dan Teknologi Republik Indonesia Nomor 39 Tahun 2021. Apabila kemudian hari dokumen ilmiah Tugas Akhir ini mengandung unsur pelanggaran integritas akademik sesuai ketentuan perundangan tersebut, maka saya bersedia menrerima sanksi akademik dan/atau sanksi hukum yang berlaku.

Demikian pernyataan ini untuk digunakan sebagaimana mestinya.

Pontianak, 4 Juni 2025



Apri Wahyudi

NIM H1031211007

ANALISIS KOMPUTASI DERIVAT ASAM FERULAT BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT) SEBAGAI MATERIAL AKTIF TABIR SURYA

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan desain struktur molekul terbaik dengan berbagai penambahan substituen pada masing-masing posisi *orto* (C6'), *meta* (C5'), dan *para* (C4') terhadap rantai utama propenoat sehingga dapat digunakan sebagai material aktif tabir surya. Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu *Density Functional Theory* (DFT) untuk keadaan dasar dan *Time Depent Density Functional Theory* (TDDFT) pada keadaan tereksitasi dengan basis set B3LYP/6-31G(d) melalui *software* Avogadro 1.2 serta Orca 4.2. Ouput yang diperoleh akan dianalisis lebih lanjut untuk menentukan tingkat orbital HOMO-LUMO, momen dipol, *band gap*, dan aktivitas antioksidan. Pengujian sifat toksisitas dilakukan menggunakan software ADMETLab 3.0. Seluruh optimasi parameter dilakukan dalam pelarut n-heksana. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa substituen etoksi ($-OCH_2CH_3$) pada posisi *orto* (C6') merupakan jenis dan posisi penambahan substituen terbaik yang ditandai dengan energi paling minimum saat tereksitasi sebesar 3,4651 eV. Aktivitas antioksidan berdasarkan nilai BDE minimum yang diperoleh sebesar 84,4640 kkal/mol. Resiko sifat toksisitas terendah berdasarkan aktivitas probabilitas juga diperoleh dengan parameter iritasi kulit sebesar 0,266; korosi Mata 0,21; karsinogenik 0,237; dan mutasi genetik 0,18. Hal ini membuktikan bahwa derivat asam ferulat dengan penambahan substituen etoksi pada posisi *orto* (C6') terhadap propenoat layak digunakan lebih lanjut sebagai material aktif tabir surya

Kata Kunci: Antioksidan, Asam Ferulat, DFT, Etoksi, Komputasi, Tabir Surya

COMPUTATIONAL ANALYSIS OF FERULIC ACID DERIVATIVES USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) AS ACTIVE SUNSCREEN MATERIAL

Abstract

This research aims to design of optimized molecular structure by introducing various substituents at the *ortho* (C6'), *meta* (C5'), and *para* (C4') positions to develop active sunscreen materials. This research employs Density Functional Theory (DFT) for ground-state analysis and Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) for excited-state analysis using the B3LYP/6-31G(d) basis set with Avogadro 1.2 and Orca 4.2 software. The resulting data were analyzed to determine HOMO-LUMO orbital energy, dipole moments, band gaps, and antioxidant activity. Toxicity assessments were carried out using ADMETLab 3.0. All molecular optimizations were performed in n-hexane solvent. The results show that the addition of an ethoxy subtituent (-OCH_2CH_3) at the ortho (C6') position provides the best structural modification, indicated by the lowest excitation energy of 3.4651 eV. The derivative also demonstrated strong antioxidant activity with a minimum bond dissociation energy (BDE) of 84.4640 kcal/mol. In terms of toxicity risk, it showed low probability values of skin irritation (0,266), eye corrosion (0,21), carcinogenicity (0,237), and genetic mutation (0,18). These results highlight that ethoxy ferulic acid derivative at ortho (C6') posisition as a promising candidate for further development active sunscreen material.

***Keywords**:* Antioxidant, Ferulic Acid, DFT, Ethoxy, Computational, Sunscreen

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "Analisis Komputasi Derivat Asam Ferulat Berbasis Density Functional Theory (DFT) sebagai Material Aktif Tabir Surya".

Skripsi ini disusun sebagai satu diantara syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains di Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Tanjungpura. Penelitian ini difokuskan pada pemodelan struktur dan sifat elektronik derivat asam ferulat menggunakan metode komputasi berbasis Density Functional Theory (DFT) dalam mengkaji potensi penggunaannya sebagai material aktif tabir surya.

Dalam proses penyusunan skripsi ini, penulis menyadari telah banyak menerima bantuan, dukungan, serta bimbingan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini, penulis juga ingin menyampaikan rasa terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Keluarga tercinta yang selalu memberikan doa, dukungan, dan semangat tanpa henti kepada penulis.
2. Ibu Berlian Sitorus S.Si., M.Si., M.sc., Ph.D selaku dosen pembimbing pertama dan Bapak Dr. Ihsanul Arief. S.Si., M.sc selaku dosen pembimbing kedua yang telah meluangkan waktu, tenaga, dan pikiran serta penuh kesabaran dalam menyelesaikan skripsi ini.
3. Bapak Dr. Ari Widiyantoro, S.Si, M.Si., selaku Dosen Penguji pertama dan Ibu Dr. Endah Sayekti, S.Si., M.Si., selaku Dosen Penguji kedua yang telah memberikan kritik, saran, serta masukan yang sangat membangun dalam proses penyempurnaan skripsi ini.
4. Bapak Prof. Dr. Gusrizal, S.Si., M.Si., selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Tanjungpura, Bapak Dr. Andi Hairil Alimuddin, S.Si., M.Si., selaku Ketua Jurusan Kimia Universitas Tanjungpura, dan Ibu Dr. Winda Rahmalia, S.Si., M.Si., selaku Ketua Prodi Jurusan Kimia Universitas Tanjungpura

5. Seluruh dosen dan staf akademik Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam yang telah memberikan ilmu dan pengalaman berharga selama masa studi.
6. Teman-teman seperjuangan yang telah menjadi sumber inspirasi, motivasi, serta tempat berbagi ilmu dan pengalaman selama masa penelitian dan penyusunan skripsi ini.
7. Semua pihak yang telah membantu secara langsung maupun tidak langsung dan penulis tidak dapat sebutkan satu per satu.

Akhir kata, penulis berharap semoga penelitian ini dapat menjadi referensi yang bermanfaat bagi pembaca serta memberikan kontribusi bagi kemajuan ilmu pengetahuan dan teknologi.

Pontianak, 22 Mei 2025

Penulis

Apri Wahyudi

H1031211007

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN ii

PERNYATAAN INTEGRITAS AKADEMIK iii

ABSTRAK iv

PRAKATA vi

DAFTAR ISI vii

DAFTAR TABEL ix

DAFTAR GAMBAR x

BAB I PENDAHULUAN 1

1.1 Latar Belakang 1

1.2 Rumusan Masalah 3

1.3 Tujuan Penelitian 3

1.4 Manfaat Penelitian 3

BAB II TINJAUAN PUSTAKA 4

2.1 Teori Kuantum dan Komputasi 4

2.2 *Density Functional Theory* (DFT) 5

2.3 Asam Ferulat dan Derivatnya 8

2.4 Tabir Surya 10

2.5 Bond Dissociation Energy (BDE) 13

2.6 Parameter Optimasi Molekul 15

2.5.1 *Band Gap* (ΔE) 15

2.5.2 Potensial Kimia (μ) 16

2.5.3 *Softness* (σ) 16

2.5.4 Nukleofilisitas (ε) 17

BAB III METODOLOGI PENELITIAN 18

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian 18

3.2 Alat 18

3.3 Molekul yang Dianalisis 18

3.4 Prosedur Kerja 20

3.4.1 Pemodelan Struktur Molekul dan Elektronik 20

3.4.2 Optimasi Geometri Struktur Molekul 20
3.4.3 Optimasi Parameter Elektronik 20
3.4.4 Penentuan Parameter Aktivitas Antioksidan 21
3.4.5 Pengujian Sifat Toksisitas 21

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 22
4.1 Optimasi Geometri Struktur Asam Ferulat dan Derivatnya 22
4.1.1 Struktur Dasar Molekul Asam Ferulat 22
4.1.2 Struktur Molekul Derivat Asam Ferulat 23
4.1.3 Momen Dipol 25
4.2 Optimasi Parameter Struktur Elektronik 26
4.3 Analisis Aktivitas Antioksidan Senyawa Asam Ferulat dan Derivatnya 30
4.4 Analisis Sifat Toksisitas Asam Ferulat dan Derivatnya 33

BAB V PENUTUP 35
5.1 Kesimpulan 35
5.2 Saran 35

DAFTAR PUSTAKA 35

LAMPIRAN 43

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Molekul Asam Ferulat dan Derivatnya yang Dianalisis Berdasarkan Jenis Substituen 19
Tabel 4.1 Hasil Optimasi Geometri Masing-Masing Posisi Substituen Derivat Asam Ferulat Berdasarkan Celah Energi.....26
Tabel 4.2 Hasil Optimasi Geometri Derivat Asam Ferulat pada Posisi Terbaik ...27
Tabel 4.3 Parameter Momen Dipol Asam Ferulat dan Derivatnya.....28
Tabel 4.4 Tingkat Energi HOMO-LUMO Senyawa Asam Ferulat dan Derivatnya 27
Tabel 4.5 Parameter Optimasi Molekul Asam Ferulat dan Derivatnya.....28
Tabel 4.6 Parameter Aktivitas Antioksidan Asam Ferulat dan Derivatnya 31
Tabel 4.7 Parameter Uji Sifat Toksisitas Molekul Asam Ferulatdan Derivatnya ..33

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Senyawa Asam Ferulat 8
Gambar 2.2 Mekanisme Absorbsi Sinar UV oleh Senyawa Organik 11
Gambar 2.3 Diagram *Band Gap* dalam Tabir Surya.....14
Gambar 4.1 Pemodelan Struktur Molekul Asam Ferulat dengan Energi Minimum 23
Gambar 4.2 Mekanisme Antioksidan Melalui Transfer Atom Hidrogen (Radikal) pada Senyawa Asam Ferulat 32

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Formulasi tabir surya telah banyak diteliti menggunakan senyawa antioksidan alami sebagai material aktif untuk meningkatkan perlindungan kulit dari paparan sinar UV. Kelompok senyawa alam yang dikenal memiliki aktivitas antioksidan tinggi yaitu turunan fenolik, satu diantaranya merupakan asam ferulat yang telah menarik perhatian dalam dunia kosmetik. Menurut laporan Peres *et al.* (2018), asam ferulat dapat meningkatkan *Sun Protection Factor* (SPF) *in vivo* sebesar 37%. Hal ini didasari oleh struktur dasar asam ferulat mengandung substituen hidroksil (-OH) dan ikatan rangkap terkonjugasi untuk memerangkap radikal bebas yang dihasilkan oleh paparan sinar UV (Matts *et al.*, 2022).

Kemampuan tinggi asam ferulat sebagai material aktif tabir surya telah banyak mendorong berbagai upaya penelitian untuk memodifikasi struktur kimia asam ferulat demi mencapai stabilitias struktur paling optimum. Namun, semakin kompleksnya material tabir surya untuk memiliki efisiensi dan ketahanan tinggi terhadap radiasi sinar UV, metode eksperimental saja sering kali tidak cukup untuk memenuhi kebutuhan penelitian karena membutuhkan waktu sangat lama dan biaya yang besar. Maka dari itu, pendekatan komputasional menjadi solusi dalam perancangan derivat struktur dan penentuan aktivitas antioksidan asam ferulat dalam memerangkap radikal bebas sebelum disintesis secara langsung. Pemodelan secara komputasi memiliki banyak keunggulan karena mampu memprediksi sifat molekul dengan biaya rendah dan waktu yang singkat berdasarkan pendekatan teoritis (Gusarov, 2024)

Pemodelan secara komputasi dapat dilakukan melalui optimasi geometri struktur sehingga diperoleh bentuk molekul paling stabil dengan energi disosiasi minimum dan distribusi muatan elektronik. Optimasi struktur geometri dapat mengidentifikasi posisi substituen terbaik sebagai antioksidan alami melalui ikatan

intramolekuler sehingga meningkatkan stabilitas terhadap fotodegradasi dan reaktivitas oksidatif sebagai material aktif tabir surya (Lee *et al.*, 2020). Optimasi geometri dilakukan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G (d). Basis set ini menggambarkan orbital atom sebagai satu kesatuan dengan melihat efek dispersi secara eksplisit sehingga dapat menjelaskan interaksi antara molekul derivat asam ferulat dengan senyawa radikal tanpa mengalami distorsi akibat gaya van der Waals (Behara *et al.*, 2024)

Penelitian yang telah dilakukan oleh Ariefin and Alfanaar (2023) dengan optimasi geometri molekul turunan senyawa kumarin menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) berbasis B3LYP/6-31G(d) menunjukkan terjadinya penurunan *band gap* sebesar 33,45% dari senyawa dasar kumarin dengan kumarin yang ditambahkan substituen hidroksil (-OH). Selain itu, penelitian yang dilakukan oleh Wulandari *et al.* (2020) dengan menggunakan metode dan basis set yang sama terhadap senyawa turunan scopoletin menghasilkan peningkatan aktivitas antioksidan hingga 81,16% dari senyawa dasar scopoletin dengan scopoletin yang ditambahkan substituen -NH_2 pada posisi *orto* melalui mekanisme *Hydrogen Atom Transfer* (HAT) dan bahkan hasil aktivitas probabilitas tinggi dalam menurunkan resiko toksisitas. Hal ini membuktikan bahwa modifikasi struktur molekul melalui penambahan substituen dan penentuan posisi secara signifikan sangat mempengaruhi kestabilan struktur molekul sebagai material aktif tabir surya dalam mengabsorpsi sinar UV serta memerangkap radikal bebas yang aman bagi tubuh (Pereira *et al*., 2020).

Sejauh ini masih belum ada publikasi yang mengeksplorasi kemampuan derivat asam ferulat sebagai material aktif tabir surya dalam menyerap paparan sinar UV, mekanisme antioksidan terhadap radikal bebas, dan pengujian toksisitasnya secara komputasi. Maka dari itu, penelitian ini menggunakan metode pemodelan molekul berbasis *Density Functional Theory* (DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G(d) yang digunakan untuk memprediksi efek penambahan substituen pendorong dan penarik serta posisinya terhadap kestabilan struktur molekul asam ferulat dan derivatnya dalam menyerap sinar UV sehingga dapat digunakan sebagai material aktif tabir surya.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah diuraikan, maka rumusan masalah yang perlu dikaji secara komputasi sebagai berikut.

1. Bagaimana optimasi geometri orbital molekul HOMO-LUMO berdasarkan perbedaan *band gap* pada senyawa asam ferulat dan derivatnya sebagai material aktif tabir surya?
2. Bagaimana aktivitas antioksidan senyawa asam ferulat dan derivatnya sebagai material aktif tabir surya dalam memerangkap radikal bebas berdasarkan *Bond Dissosiation Energy* (BDE)?
3. Bagaimana sifat toksisitas senyawa asam ferulat dan derivatnya sebagai material aktif dalam formulasi tabir surya berdasarkan aktivitas probabilitas?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini dilakukan secara komputasi sebagai berikut.

1. Memperoleh optimasi geometri berdasarkan *band gap* pada senyawa asam ferulat dan derivatnya sebagai material aktif tabir surya
2. Memperoleh aktivitas antioksidan asam ferulat dan derivatnya sebagai material aktif tabir alam memerangkap radikal bebas berdasarkan *Bond Dissosiation Energy* (BDE)
3. Memperoleh sifat toksisitas asam ferulat dan derivatnya sebagai material aktif tabir surya berdasarkan aktivitas probabilitas

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan mampu memberikan wawasan tentang modifikasi struktural pada derivat asam ferulat sehingga dapat meningkatkan efektivitasnya sebagai bahan aktif dalam produk tabir surya. Selain itu, hasil dari penelitian ini juga diharapkan dapat menjadi landasan bagi penelitian berikutnya yang berfokus pada pengembangan formulasi baru dan strategi untuk memperkuat perlindungan kulit terhadap radiasi sinar UV dengan memanfaatkan derivat asam ferulat.