

**ANALISIS TEORITIK OKSIBENZON MODIFIKASI SEBAGAI BAHAN
DASAR FILTER UV PADA TABIR SURYA MENGGUNAKAN
METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

DIANA SARTIKA FITRI

NIM : 1810412058



Pembimbing I : Prof. Dr. Hermansyah Aziz

Pembimbing II : Dr. Imelda

**PROGRAM STUDI SARJANA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2022**

INTISARI

ANALISIS TEORITIK OKSIBENZON MODIFIKASI SEBAGAI BAHAN DASAR FILTER UV PADA TABIR SURYA MENGGUNAKAN METODE DFT

Oleh:

Diana Sartika Fitri (BP:1810412058)
Prof. Dr. Hermansyah Aziz, Dr. Imelda

Bahaya paparan sinar matahari yang mengandung ultraviolet dapat dicegah dengan penggunaan tabir surya, hal ini dikarenakan tabir surya mengandung beberapa *filter* UV. Salah satu filter UV yang sering terkandung pada tabir surya yaitu oksibenzon. Pada penelitian ini dilakukan analisis dari molekul oksibenzon modifikasi dengan penambahan gugus penarik dan pendorong elektron secara teoritik menggunakan metode DFT dengan basis set B3LYP/6-31G. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh modifikasi struktur oksibenzon terhadap karakteristik sebagai filter UV. Berdasarkan parameter *bandgap* (ΔE), panjang ikatan(r), potensial kimia (μ), hardness (η), softness (σ), elektronegativitas (χ) dan momen dipol, didapatkan hasil penelitian menunjukkan modifikasi struktur oksibenzon dengan penambahan gugus pendorong dan penarik elektron mampu meningkatkan serapan cahaya oksibenzon sebagai filter UV. Struktur modifikasi oksibenzon yang terbaik adalah dengan penambahan gugus pendorong NH_2 dengan panjang gelombang serapan cahaya mencapai 322,80 nm dan gugus penarik yaitu NO_2 dengan panjang gelombang serapan cahaya mencapai 366,47 nm.

Kata kunci: Tabir surya, *Filter* UV, Oksibenzon, DFT, Modifikasi struktur

ABSTRACT

THEORETICAL ANALYSIS OF MODIFIED OXYBENZONE STRUCTURE AS THE BASIC MATERIAL OF UV FILTERS ON SUNSCREEN USING THE DFT METHOD

By :

Diana Sartika Fitri (BP:1810412058)
Prof. Dr. Hermansyah Aziz, Dr. Imelda

The harmful of sun exposure containing ultraviolet can be prevented by the use of sunscreen, this is because sunscreen contains several UV Filters. One among UV Filters formulated in sunscreen product is oxybenzone. Oxybenzone is a UV Filter that others than in Benzopenon. In this study, a structural modification of the oxybenzone molecule was carried out by the addition of electron donor and electron acceptor using the computation chemistry method. The calculation method used is the DFT method with a B3LYP/6-31G basis set. The aim of this study is to determine the effect of oxybenzone structure modification on the characteristics of UV Filters. Based on parameter values of bandgap (ΔE), bond length (r), chemical potential (μ), hardness (η), softness (Σ), electronegativity (χ), and dipole moment, the results of the study showed the modification of the oxybenzone structure with the addition of electron donor and electron acceptor increase the efficiency of oxybenzone as a Filter uv. The modification structure of oxybenzone is with the addition of the NH_2 electron donor with light absorption reaching 322,80 nm and the electron acceptor NO_2 with light absorption reaching 366,47 nm.

Keywords: Sunscreen, Filter UV, Oxybenzone, DFT, Modification structure