

**ANALISIS STABILITAS AVOBENZON DAN TURUNANNYA SEBAGAI
BAHAN DASAR *SUNSCREEN* MENGGUNAKAN METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

INDAH PRATIWI

BP : 1710413023



Dosen Pembimbing I : Prof. Dr. Hermansyah Aziz

Dosen Pembimbing II : Imelda, M.Si

**PROGRAM STUDI SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2021**

INTISARI

ANALISIS STABILITAS AVOBENZON DAN TURUNANNYA SEBAGAI BAHAN DASAR *SUNSCREEN* MENGGUNAKAN METODE DFT

Oleh:

Indah Pratiwi (Bp: 1710413023)

Prof. Dr. Hermansyah Aziz*, Imelda M.Si*

*Pembimbing

Filter ultraviolet organik seperti sinamat, benzofenon dan avobenzon (yang terpercaya dan diakui banyak digunakan dalam produk kosmetik/farmasi) karena dapat melindungi kulit dan mampu meminimalkan kerusakan kulit akibat paparan sinar UV. Pada penelitian ini dilakukan modifikasi struktur dari molekul avobenzon dengan penambahan gugus penarik dan pendorong elektron untuk melihat stabilitas sebagai sunscreen dengan menggunakan metode kimia komputasi. Metode perhitungan yang digunakan yaitu metode DFT dengan basis set B3LYP/6-31G. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan struktur terbaik dari molekul avobenzon yang dapat meningkatkan fotostabilitas sebagai tabir surya. Berdasarkan parameter nilai *bandgap*(ΔE), panjang ikatan, sudut ikatan, potensial kimia(μ), *hardness*(η), *softness*(σ), momen dipol, entalpi reaksi (ΔH) dan energi bebas gibbs reaksi (ΔG), didapatkan hasil penelitian yang menunjukkan bentuk tautomer enol lebih stabil daripada tautomer keto molekul avobenzon dengan nilai panjang gelombang sebesar 312,6 nm. Pengaruh penambahan gugus pendorong dan penarik elektron juga dapat meningkatkan fotostabilitas dari molekul avobenzon. Molekul avobenzon yang ditambahkan dengan gugus pendorong NH₂ meningkatkan nilai panjang gelombang menjadi sebesar 338,4 nm sehingga dapat meningkatkan efek fotostabilitas dari molekul avobenzon tersebut.

Kata kunci: Avobenzon, Fotostabilitas, DFT, *Sunscreen*, Sinar UV

ABSTRACT

STABILITY ANALYSIS OF AVOBENZONE AND DERIVATIVES AS SUNSCREEN BASIC INGREDIENTS USING DFT METHOD

By:

Indah Pratiwi (Bp: 1710413023)

Prof. Dr. Hermansyah Aziz*, Imelda M.Si*

*Supervisor

Organic ultraviolet filters such as cinnamate, benzophenone and avobenzene (which are trusted and recognized widely used in cosmetic/pharmaceutical products) because they can protect the skin and are able to minimize skin damage caused by sun exposure. In this study, modification of the structure of the avobenzene molecule with the addition of electron donating and electron acceptor groups was carried out to observe the stability as a sunscreen using computational chemistry methods. The calculation method used is the DFT method with B3LYP/6-31G the base set. This study aims to determine the best structure of the avobenzene molecule that with high photostability as a sunscreen. Based on the parameter values of bandgap (ΔE), bond length, bond angle, chemical potential(μ), hardness(η), softness(σ), dipole moment, enthalpy(ΔH) and gibbs free energy(ΔG), the result of research that shows the form of the enol tautomer is more stable than the keto tautomer of avobenzene molecule with a wavelength value of 312,6 nm. The effect of adding a electron donating and electron acceptor group can also increase the photostability of the avobenzene molecule. The avobenzene molecule added with the NH₂ electron donating can increase the wavelength value to 338,4 nm so that it can increase the photostability effect of the avobenzene molecule.

Keywords: Avobenzene, Photostability, DFT, Sunscreen, UV light