

BAB I

PENDAHULUAN

I.1. Latar Belakang

Vitamin C atau asam askorbat merupakan suplemen yang sering digunakan karena memiliki banyak manfaat bagi kesehatan sebagai antioksidan. Antioksidan berperan dalam melindungi sel-sel tubuh dari kerusakan akibat radikal bebas. Radikal bebas merupakan molekul yang tidak stabil dan dapat merusak sel-sel tubuh sehingga dapat menyebabkan berbagai penyakit. Vitamin C berperan sebagai akseptor elektron yang larut air dan dapat melindungi membran sel dari kerusakan oksidatif. Fungsi vitamin C meliputi: sintesis kolagen, penyerapan zat besi, regulasi tekanan darah, aktivitas antioksidan, dan anti-inflamasi (Du dkk., 2012).

Vitamin C atau asam askorbat akan terdegradasi menjadi dehidroaskorbat. Studi telah menunjukkan bahwa dehidroaskorbat lebih stabil dalam bentuk terhidrasi sebagai bisiklik hemiketal. Namun dalam banyak literatur ilmiah struktur trikarbonil masih sering dijadikan sebagai acuan. Ketidaksesuaian antara pemahaman teoritis dan data empiris menyoroti pentingnya penelitian lebih lanjut untuk mengungkap struktur dan sifat kimia vitamin C dalam berbagai kondisi. Studi ini menggabungkan pendekatan komputasi dan eksperimen untuk menganalisis gugus fungsi vitamin C. Studi komputasi digunakan untuk memprediksi struktur molekul vitamin C dan turunannya, sementara spektroskopi FTIR digunakan untuk memverifikasi hasil simulasi dan mengamati perubahan struktur gugus fungsi selama penyimpanan jangka pendek (Njus dkk., 2020).

Secara umum kestabilan molekul dalam pelarut yang berbeda menjadi penting dalam industri pembuatan obat terutama saat proses kristalisasi untuk pemurnian dan persiapan obat padat. Investigasi eksperimen mengenai data kestabilan vitamin C merupakan kegiatan yang ekstensif dan cukup mahal (Balbinot Filho dkk., 2024; Nemdili dkk., 2022). Studi komputasi kimia kuantum membantu dalam peningkatan pemahaman tentang struktur, sifat, dan reaktivitas molekul. Model komputasi memungkinkan untuk melihat visualisasi tiga dimensi dari molekul. Energi molekul dapat memprediksi stabilitas relatif dari berbagai struktur vitamin C dan turunannya. Prediksi spektrum seperti IR dan UV-Vis dapat dibandingkan dengan data eksperimental untuk memvalidasi model. Model pelarut yang digunakan adalah CPCM untuk memperhitungkan efek pelarut pada struktur, energi, dan sifat molekul (Nasidi dkk., 2024a).

Vitamin C dan berbagai manfaatnya sering dijadikan bahan aktif obat, namun penelitian lebih lanjut mengenai kestabilan vitamin C perlu dilakukan dengan diberikan efek pelarut dan temperatur untuk memberikan keterbaruan informasi mengenai vitamin C (Kusuma Dewi dkk., 2013). Penelitian ini dilakukan menggunakan metode spektrofotometri UV-Vis dan FTIR dengan dibandingkan metode kimia komputasi *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent Density Functional theory* (TDDFT) untuk mengetahui karakteristik struktur kestabilan vitamin C. Keterkaitan hubungan antara struktur molekul vitamin C dengan sifat fisikokimia yang dimiliki mampu mempermudah merancang kondisi penyimpanan dan formulasi yang optimal untuk produk farmasi. Analisis komputasi dan eksperimental yang terintegrasi akan memberikan wawasan baru

dalam pengembangan produk berbasis vitamin C yang lebih stabil dan efektif. Penelitian metode kimia komputasi dan perbandingannya dengan hasil eksperimen diharapkan mampu memberikan keterbaruan yang bermanfaat dalam studi kedepannya.

I.2. Tujuan Penelitian

- I.3.1. Menentukan perubahan struktur geometri vitamin C dan karakteristik molekul vitamin C
- I.3.2. Menentukan kestabilan vitamin C yang diberikan efek pelarut dan temperatur