

ABSTRAK

Vitamin C atau asam askorbat ($C_6H_8O_6$) adalah senyawa organik yang banyak ditemukan pada buah dan sayuran. Struktur molekulnya mirip monosakarida dengan gugus enediol, menjadikan vitamin C sebagai antioksidan kuat. Vitamin C membentuk cincin lakton dengan ikatan rangkap $C=O$ dan $C=C$. Senyawa ini larut air dan berfungsi sebagai akseptor elektron untuk melindungi sel dari kerusakan radikal bebas. Spektrofotometer UV-Vis maupun FTIR merupakan teknik yang sangat berguna untuk mengidentifikasi keberadaan gugus $C=C$ dan $C=O$ dalam vitamin C sehingga dapat memperoleh informasi yang lebih lengkap tentang kestabilan struktur suatu molekul. Penelitian skala molekular diperlukan untuk memahami kestabilan vitamin C menggunakan metode DFT dan TDDFT. Struktur vitamin C memiliki kestabilan yang berbeda ketika diberikan pengaruh temperatur dan pelarut yang berbeda. Diduga hasil analisis *in silico* dan *in vitro* menunjukkan pola perubahan kestabilan struktur vitamin C yang serupa namun dapat memiliki perbedaan kuantitatif. Metodologi yang digunakan dalam penelitian berupa pendekatan secara kimia kuantum menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TDDFT) basis set B3LYP 6-31G** dengan model pelarut CPCM. Pengaruh temperatur juga diberikan dalam penelitian komputasi untuk mengetahui energi termodinamika yang dimiliki vitamin C. Perhitungan fasa gas dilakukan dengan diberikan efek temperatur dengan variasi temperatur 273,15K; 298,15K; 310,15K; 313,15K; dan 333,15K. Variasi pelarut berupa air, DMSO, metanol, etanol, dan aseton. Kestabilan struktur vitamin C dipengaruhi oleh beberapa faktor salah satunya adalah temperatur dan efek pelarut. Hasil penelitian kestabilan vitamin C yaitu berdasarkan perubahan spektra IR dan UV selama seminggu diketahui bahwa terjadi degradasi pada struktur vitamin C selama waktu penyimpanan. Stabilitas vitamin C berdasarkan pelarut yang digunakan dalam penelitian, urutan dari yang paling stabil adalah aseton > etanol > metanol > DMSO > air. Berdasarkan hasil penelitian diketahui bahwa urutan kestabilan vitamin C secara komputasional paling stabil pada suhu rendah adalah 273,15K > 298,15K > 310,15K > 313,15K > 333,15K. Studi interaksi kestabilan vitamin C menunjukkan terjadi perubahan energi potensial, muatan parsial, sifat termodinamika, aktivitas UV-Vis, serta band gap HOMO-LUMO. Pelarut vitamin C yang paling stabil berada pada pelarut aseton, semakin lebih non polar semakin stabil namun kelarutan semakin berkurang.

Kata kunci: Vitamin C, Kestabilan Struktur, DFT, Efek Pelarut, Efek Temperatur

Semarang, 31 Desember 2024

Menyetujui

Pembimbing I,

Pembimbing II,


Prof. Dr. Parsaoran Siahaan, M.S.
NIP. 196404241990011001


Prof. Dr. Dra. Dwi Hudiayanti, M.Sc.
NIP. 196506221989032001

ABSTRACT

Vitamin C or ascorbic acid ($C_6H_8O_6$) is an organic compound found in many fruits and vegetables. Its molecular structure is similar to monosaccharides with an enediol group, making vitamin C a powerful antioxidant. Vitamin C forms a lactone ring with double bonds $C=O$ and $C=C$. This compound is water-soluble and functions as an electron acceptor to protect cells from free radical damage. UV-Vis and FTIR spectrophotometers are very useful techniques for identifying the presence of $C=C$ and $C=O$ groups in vitamin C so that more complete information can be obtained about the stability of a molecule's structure. Molecular-scale research is needed to understand the stability of vitamin C using the DFT and TDDFT methods. The structure of vitamin C has different stability when given different temperatures and solvents. It is suspected that the results of *in silico* and *in vitro* analysis show a similar pattern of changes in the stability of the vitamin C structure but can have quantitative differences. The methodology used in the study is a quantum chemical approach using the Density Functional Theory (DFT) and Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) basis set B3LYP 6-31G** with the CPCM solvent model. The effect of temperature is also given in the computational study to determine the thermodynamic energy of vitamin C. The calculation of the gas phase was carried out by giving the effect of temperature with temperature variations of 273.15K; 298.15K; 310.15K; 313.15K; and 333.15K. Variations in solvents include water, DMSO, methanol, ethanol, and acetone. The stability of the vitamin C structure is influenced by several factors, one of which is temperature and the effect of the solvent. The results of the study of the stability of vitamin C, namely based on changes in the IR and UV spectra for a week, show that there is degradation in the structure of vitamin C during storage time. The stability of vitamin C based on the solvent used in the study, the order from the most stable is acetone > ethanol > methanol > DMSO > water. Based on the research results, it is known that the computational stability order of vitamin C is most stable at low temperatures is 273.15K > 298.15K > 310.15K > 313.15K > 333.15K. The interaction study of vitamin C stability shows changes in potential energy, partial charge, thermodynamic properties, UV-Vis activity, and HOMO-LUMO band gap. The most stable vitamin C solvent is acetone, the more non-polar the more stable but the solubility decreases.

Keywords: Vitamin C, Structural Stability, DFT, Solvent Effect, Temperature Effect

Semarang, 31 Desember 2024

Approved by

Supervisor I,



Prof. Dr. Parsaoran Siahaan, M.S.
NIP. 196404241990011001

Supervisor II,



Prof. Dr. Dra. Dwi Hudyanti, M.Sc.
NIP. 196506221989032001