

Simulasi DFT/TD-DFT untuk Analisis Sifat Anti-UV pada Turunan Kuersetin Termodifikasi Gugus Metoksi

Farrel Hafiz Aldwinarta¹

¹Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Malang
Jl. Semarang No. 5, Malang, 65145, Indonesia

* Corresponding author: farrel.hafiz.2003316@students.um.ac.id

ABSTRAK

Paparan sinar UV dapat menyebabkan kerusakan kulit, sehingga pengembangan senyawa anti-UV menjadi penting. Kuersetin dan turunannya merupakan kandidat potensial karena aktivitas fotoprotektifnya. Penelitian ini memodifikasi struktur kuersetin melalui substitusi gugus hidroksil dengan gugus metoksi untuk meningkatkan sifat penyerapan UV. Penelitian ini mengkaji tiga turunan kuersetin tersubstitusi metoksi ganda pada C8 dan C14 yang divariasi dengan menambahkan substitusi metoksi tunggal pada posisi C1 (DMQ2m), C6 (DMQ3m), dan C15 (DMQ4m) menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time-Dependent DFT* (TD-DFT) dengan basis set B3LYP/def2-SVP. Parameter yang dianalisis meliputi geometri molekul, momen dipol, energi celah HOMO-LUMO, dan spektrum UV-Vis. Hasil menunjukkan bahwa substitusi metoksi meningkatkan momen dipol seluruh turunan dibandingkan nDMQ (4,208 D). DMQ2m memiliki energi celah paling rendah (3,747 eV) dan puncak absorpsi paling panjang (343 nm), diikuti DMQ3m (4,063 eV; 321 nm) dan DMQ4m (4,074 eV; 318 nm). Hasil penelitian menunjukkan bahwa turunan kuersetin termodifikasi dengan substitusi metoksi pada posisi C3, C5, C7, dan C4' (DMQ2m) memiliki potensinya sebagai senyawa anti-UV.

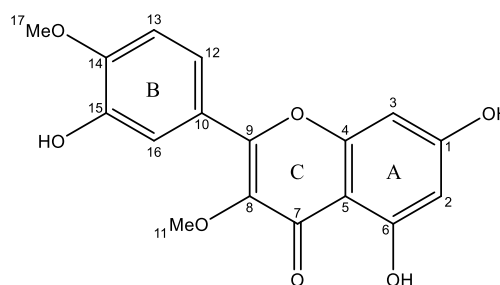
Kata Kunci: Anti-UV, *Density Functional Theory*, Kuersetin

PENDAHULUAN

Radiasi sinar ultraviolet (UV) dari matahari merupakan salah satu faktor utama penyebab kerusakan kulit, mulai dari penuaan dini hingga risiko kanker [1], [2], [3], [4]. Radiasi UV terbagi menjadi tiga kategori berdasarkan panjang gelombangnya, yaitu UV-C (100–280 nm), UV-B (280–315 nm), dan UV-A (315–400 nm) [5], [6]. Sebagian besar UV-C diserap oleh lapisan ozon [7], [8]. Sedangkan UV-A dan UV-B dapat mencapai permukaan bumi. Paparan ekstrim pada sinar ini dapat menimbulkan efek kerusakan pada kulit [9]. Oleh karena itu, perlindungan terhadap radiasi UV menjadi penting. Flavonoid, khususnya kuersetin, telah menarik perhatian karena kemampuannya menyerap radiasi UV sekaligus berperan sebagai antioksidan yang menetralkan radikal bebas hasil paparan UV [10].

Kuersetin dan turunannya telah banyak dikaji dalam berbagai penelitian terkait fotoproteksi. Penelitian sebelumnya melaporkan bahwa turunan kuersetin dapat melindungi kulit dari kerusakan akibat radiasi UV ketika diformulasi dalam sistem penghantaran modern seperti gliserom, pembawa lipid terstruktur nano, atau

liposom yang dapat berubah bentuk [11]. Temuan ini menunjukkan potensi besar turunan kuersetin dalam pengembangan tabir surya berbasis nanoteknologi. Lebih lanjut, penelitian terdahulu [12] berhasil menghitung secara komputasi bahwa kuersetin dengan dua substitusi metoksi sebagai pengganti gugus hidroksil, yang ditunjukkan pada Gambar 1, menunjukkan absorbansi tinggi di daerah UV-A.



Gambar 1. Turunan kuersetin dengan dua gugus metoksi (nDMQ)

Temuan tersebut menginspirasi penelitian lebih lanjut untuk mempelajari efek metilasi gugus hidroksil lainnya pada senyawa turunan kuersetin yang sama. Namun, efek substitusi tambahan metoksi pada atom C1, C6, dan C15 pada nDMQ

terhadap sifat serapan sinar UV belum dikaji dengan metode komputasi sehingga konfigurasi substitusi metoksi yang optimal masih belum diketahui. Berdasarkan latar belakang tersebut, penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi konfigurasi metoksi yang optimal guna meningkatkan proteksi UV pada senyawa turunan kuersetin. Penelitian ini berkontribusi dalam memetakan posisi substitusi gugus metoksi pada turunan kuersetin melalui pendekatan TD-DFT yang belum pernah dilaporkan sebelumnya. Pada penelitian ini, dibahas tiga senyawa turunan kuersetin yang masing-masing dimodifikasi gugus hidroksilnya dengan gugus metoksi. Gugus $-CH_3$ menggantikan $-OH$ di C1 (DMQ2m), di C6 (DMQ3m), dan di C15 (DMQ4m).

BAHAN DAN METODE

Bahan

Studi komputasi dilakukan dengan menggunakan laptop dengan prosesor AMD Ryzen 5 5600H (~3.3 GHz) dan kapasitas RAM 16 GB. Perangkat lunak yang digunakan yaitu Avogadro pemodelan molekul 3D dan visualisasi molekul teroptimasi [13], IboView untuk visualisasi HOMO dan LUMO [14], Microsoft Excel untuk *plotting* absorbansi, dan Orca (v6.0.1) [15] untuk optimasi geometri dan perhitungan energi dan frekuensi vibrasional.

Metode

Proses komputasi diawali dengan pembangunan struktur 3D menggunakan Avogadro. Selanjutnya, *file input* untuk program Orca disiapkan melalui aplikasi yang sama dengan menggunakan *simple input*: ! B3LYP opt freq largeprint def2-SVP RIJCOSX. Input tersebut menginstruksikan Orca untuk melakukan optimasi geometri dan perhitungan energi menggunakan teori B3LYP dengan basis set def2-SVP, serta aproksimasi RIJCOSX untuk mempercepat komputasi [16], [17]. Metode dan basis set ini dipilih karena dapat memberikan hasil yang seimbang antara akurasi dan efisiensi komputasi untuk molekul organik sederhana [18], [19]. File input kemudian dieksekusi melalui command prompt (cmd) dengan sintaks `orca namafile.inp > namafile.out`.

Setelah proses optimasi selesai, *file output* (.out) dibuka kembali di Avogadro untuk visualisasi

struktur teroptimasi. Data geometri molekuler, termasuk momen dipol, panjang ikatan, sudut ikatan, dan sudut torsional, dapat diperoleh melalui menu *View > Properties*.

Untuk analisis orbital molekul, energi HOMO dan LUMO di dapat dengan menjalankan perintah `orca_2mkl namafile -molden` pada cmd. File hasil konversi (*.molden.input*) kemudian dibuka menggunakan IboView. Seluruh orbital molekul beserta nilai energinya dapat ditampilkan dengan menekan tombol *Data Sets*. Visualisasi orbital dilakukan dengan mengklik dua kali pada orbital yang diinginkan.

Selanjutnya, simulasi spektrum UV-Vis dilakukan dengan memanfaatkan struktur teroptimasi dalam format .xyz. File *input* Orca disiapkan dengan *simple input* dan *block input*:

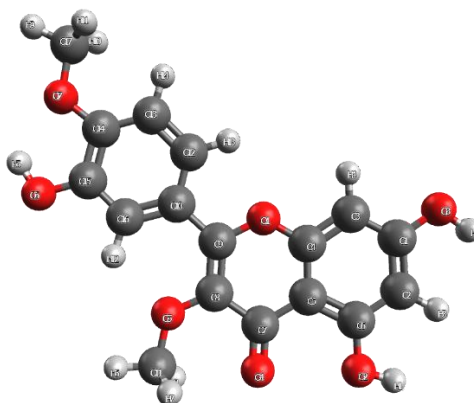
```
! B3LYP
%tddft
nroots 50
maxdim 5
end
```

Perhitungan *Time-Dependent Density Functional Theory* (TDDFT) dijalankan menggunakan perintah `orca namafile_tddft.inp > namafile_tddft.out`. Data absorbansi kemudian diekstrak dengan menjalankan: `orca_mapspc namafile_tddft.out ABS` dan diplot menggunakan Microsoft Excel untuk visualisasi spektrum.

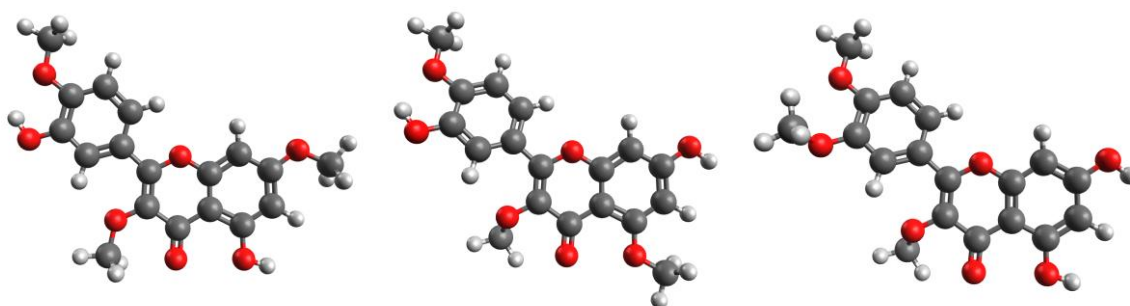
HASIL DAN PEMBAHASAN

Optimasi Geometri

Optimasi geometri molekul dilakukan menggunakan bantuan ORCA untuk memperoleh struktur tiga dimensi yang paling stabil. Tahap ini bertujuan untuk menemukan konfigurasi atom dengan energi potensial minimum pada permukaan energi potensial. Struktur teroptimasi ini merepresentasikan keadaan dasar molekul yang mendekati kondisi eksperimental [20], [21]. Struktur nDMQ beserta labelnya disajikan pada 2 dan struktur turunannya pada 3.



Gambar 2. nDMQ beserta label-nya



Gambar 3. Struktur teroptimasi berurutan dari kiri: DMQ2m, DMQ3m, dan DMQ4m.

Panjang ikatan adalah jarak antarinti atom dari dua atom yang berikatan. Panjang ikatan setelah dioptimasi disajikan pada **Error! Reference source not found.** Pada penelitian, ini panjang ikatan C—C pada struktur cincin tidak berubah signifikan akibat adanya metilasi gugus —OH. Pada struktur DMQ3m, gugus metil yang menggantikan atom H pada gugus —OH di nomor atom C6 sedikit memperpanjang ikatan

C5—C6. Hal serupa terjadi pada ikatan C1—C3 pada struktur DMQ2m dan ikatan C15—C16 pada struktur DMQ4m. Substitusi atom H dengan metil pada gugus —OH memperpanjang ikatan C—C dalam cincin yang mengikat gugus tersebut. Kendati demikian, perubahan panjang ikatan C—C cincin benzena tersebut tidak signifikan [19], [12].

Tabel 1. Panjang ikatan pada senyawa turunan kuersetin setelah struktur dioptimasi.

Ikatan	Panjang Ikatan Senyawa (Å)			Ikatan	Panjang Ikatan Senyawa (Å)		
	DMQ2m	DMQ3m	DMQ4m		DMQ2m	DMQ3m	DMQ4m
C1—C2	1,40827	1,40912	1,40684	C11—O5	1,42573	1,42785	1,42831
C1—C3	1,39609	1,39054	1,39318	C12—C13	1,39788	1,39856	1,3961
C1—O3	1,35247	1,35386	1,35317	C12—H13	1,08825	1,08924	1,08971
C2—C6	1,39978	1,39863	1,3979	C13—C14	1,39502	1,39521	1,40156
C2—H2	1,09123	1,09068	1,09571	C13—H14	1,09096	1,09086	1,09042
C3—C4	1,39643	1,39972	1,39831	C14—C15	1,41325	1,41483	1,41866
C3—H3	1,08934	1,08935	1,08936	C14—O7	1,36661	1,36577	1,35583
C4—C5	1,41107	1,40901	1,41096	C15—C16	1,39014	1,3902	1,39101
C4—O1	1,34807	1,35415	1,35416	C15—O6	1,35584	1,35462	1,36623
C5—C6	1,42396	1,43081	1,42501	C16—H12	1,08495	1,08704	1,08717
C5—C7	1,47465	1,47905	1,47788	C17—H10	1,10487	1,10476	1,10522
C6—O2	1,34621	1,34218	1,34527	C17—H8	1,09852	1,09841	1,09846
C7—C8	1,48568	1,48389	1,48282	C17—H9	1,10491	1,10477	1,10483
C7—O4	1,22693	1,22545	1,22529	C17—O7	1,41127	1,41189	1,41123

Ikatan	Panjang Ikatan Senyawa (Å)			Ikatan	Panjang Ikatan Senyawa (Å)		
	DMQ2m	DMQ3m	DMQ4m		DMQ2m	DMQ3m	DMQ4m
C8—C9	1,37926	1,37131	1,37179	O3—H1	-	0,966282	0,966314
C8—O5	1,35262	1,3588	1,35875	O2—H1	0,966882	-	0,966866
C9—C10	1,47629	1,4766	1,47514	O6—H4	0,970305	0,970396	-
C9—O1	1,36974	1,36609	1,36704	C'—O3	1,41119	-	-
C10—C12	1,41061	1,40756	1,40667	C'—O2	-	1,40901	-
C10—C16	1,41497	1,41315	1,41264	C'—O6	-	-	1,41971
C11—H5	1,10057	1,09923	1,09916	C'—H15	1,0984	1,0981	1,09953
C11—H6	1,0985	1,09829	1,09827	C'—H16	1,10499	1,10526	1,10204
C11—H7	1,0985	1,10501	1,10496	C'—H17	1,10497	1,10544	1,10595

Tabel 2. Sudut ikatan dan sudut torsi senyawa turunan kuersetin setelah struktur dioptimasi.

Sudut	DMQ2m	DMQ3m	DMQ4m
C—O—C'	119,9°	120,3°	117,3°
*C—O—H'	*109,9°	*109,0°	*107,1°
C _{8,9,10,16}	0,5°	17,7°	17,4°

Sudut ikatan didefinisikan sebagai bagian sudut orbital hibrida di sepanjang arah ikatan [22]. Sudut ikatan dibentuk oleh tiga atom yang berikatan. Sudut ikatan disajikan **Error! Reference source not found.** Sudut ikatan C—O—C', dengan C' adalah atom C dari metil yang menggantikan H, berubah signifikan dibandingkan C—O—H'. Hal ini terjadi karena gugus —OCH₃ berukuran besar dan menimbulkan efek tolakan elektron yang sebanding dengan ukurannya [19].

Sudut dihedral atau sudut torsi adalah sudut rotasi di sekitar sumbu ikatan [23]. Sudut torsi dibentuk oleh empat atom yang berikatan. Sudut ini menyatakan planar atau tidaknya suatu senyawa [12], [24]. Sudut torsi yang disajikan pada **Error! Reference source not found.** adalah sudut yang dibentuk oleh atom C8, C9, C10, dan C16. Sudut ini menunjukkan planaritas cincin B terhadap cincin A dan C. Pada senyawa DMQ2m, gugus metil yang terikat pada O3 tidak memberikan kontribusi yang signifikan pada sudut torsi. Ini karena gugus tersebut terorientasi pada ruang terbuka. Sehingga cincin B relatif planar dengan cincin A dan C. Sedangkan pada DMQ3m, gugus metil yang terikat pada atom O2 terletak berdekatan dengan gugus metoksi di atom C8. Gugus ini memberikan tolakan terhadap cincin B. Untuk mengurangi tolakan tersebut, cincin B akan mengalami rotasi sehingga sudut dihedralnya akan menjadi lebih besar [19]. Kasus yang serupa juga terjadi pada gugus metil pada atom O6 pada senyawa DMQ4m.

Momen Dipol Turunan Kuersetin

Momen dipol mencerminkan distribusi kerapatan elektron dalam suatu molekul [11]. Hasil perhitungan momen dipol disajikan pada **Error! Reference source not found.** Berdasarkan hasil komputasi, substitusi satu gugus hidroksi dengan gugus metoksi meningkatkan momen dipol molekul. Substitusi metil terhadap atom H yang terikat pada O3 (DMQ2m) menyebabkan peningkatan momen dipol yang cukup signifikan dibandingkan nDMQ. Hal ini terjadi karena gugus —CH₃ pada metoksi mendonasikan elektron secara induktif kepada atom O3 melalui ikatan sigma sehingga kerapatan elektron di sekitar oksigen meningkat. Efek ini sedikit meredakan distribusi elektron dari C1 ke O3. Sedangkan pada senyawa DMQ3m dan DMQ4m, momen dipolnya tidak berbeda signifikan. Ini karena efek sudut torsi lebih dominan meningkatkan momen dipol [12].

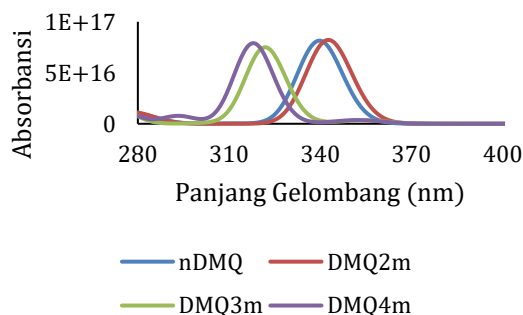
Tabel 3. Momen dipol senyawa kuersetin dan turunannya.

Senyawa	Momen Dipol (D)
nDMQ	4,207774620
DMQ2m	4,778697957
DMQ3m	4,791702877
DMQ4m	4,794802904

Serapan UV Turunan Kuersetin

Radiasi sinar ultraviolet (UV) dibagi menjadi tiga kategori, yaitu UV-A (320-400 nm), UV-B (280-320 nm), dan UV-C (200-280 nm) [5], [6]. Radiasi

UV-C diserap oleh atmosfer bumi sehingga tidak menjadi fokus pada penelitian ini [7], [8]. Spektrum UV dari nDMQ, DMQ2m, DMQ3m, dan DMQ4m ditunjukkan pada **Error! Reference source not found.4**.



Gambar 4. Spektra UV senyawa kuersetin dan turunannya

Senyawa DMQ2m dimodifikasi dengan mengganti gugus -OH pada C1 dengan gugus -OCH₃. Senyawa ini menunjukkan potensi sebagai anti-UV terhadap UV-A dengan puncak absorbansi pada 343 nm. Jika gugus -OCH₃ menggantikan -OH pada C6, seperti pada senyawa DMQ3m, puncak absorbansi bergeser ke panjang gelombang yang lebih pendek, yaitu 321 nm. Sementara itu, ketika gugus -OCH₃ menggantikan -OH pada C15, seperti pada senyawa DMQ4m, puncak absorbansi bergeser lebih pendek lagi, yakni 318 nm. Berdasarkan hasil perhitungan tersebut, DMQ4m menunjukkan aktivitas anti-UV paling optimal untuk UV-A dan UV-B karena puncak absorbansi berada di perbatasan kedua wilayah tersebut. Sebaliknya, DMQ2m merupakan senyawa yang paling optimal untuk perlindungan terhadap UV-A.

Gugus metoksi adalah pendonor elektron melalui efek resonansi mesomerik positif. Substitusi metoksi pada posisi tertentu memperluas sistem konjugasi pada molekul. Distribusi sistem konjugasi ini menurunkan E_g HOMO-LUMO dan menggeser absorpsi ke panjang gelombang yang lebih panjang (*redshift*) [25].

Substitusi metoksi pada posisi C1 (DMQ2m) berada langsung pada cincin A yang terkonjugasi dengan gugus karbonil pada cincin C. Substitusi pada posisi ini memungkinkan donasi elektron resonansi langsung ke dalam sistem π pada inti flavonoid, sehingga perluasan konjugasi

terbentuk paling besar dan absorpsi bergeser paling jauh ke UV-A (343 nm). Sedangkan substitusi metoksi pada C6 (DMQ3m) dan C15 (DMQ4m), meningkatkan sudut dihedral C_{8,9,10,16} (berturut-turut 17,7° dan 17,4°) akibat efek sterik yang dihasilkan. Hal ini menyebabkan molekul menjadi lebih bengkok (*twisted*). Konjugasi yang optimal terbentuk akibat tumpang tindih orbital p yang sejajar [26].

Energi Celah Turunan Kuersetin

HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) adalah orbital molekul dengan energi tertinggi yang terisi elektron. Sebaliknya, LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) adalah orbital molekul dengan energi terendah yang belum terisi elektron. Nilai HOMO yang lebih tinggi (kurang negatif) mengindikasikan bagian yang lebih mampu mendonor elektron sedangkan LUMO yang lebih rendah menunjukkan bagian yang lebih mampu menerima elektron. Analisis energi pada HOMO dan LUMO memberikan penjelasan mekanisme transisi elektronik dalam elektron [27]. Selisih energi antara HOMO dan LUMO disebut sebagai energi celah (E_g). Energi celah merupakan energi minimum yang diperlukan untuk mengeksitasi elektron dari HOMO ke LUMO [28]. Energi celah menunjukkan seberapa mudah elektron tereksitasi akibat radiasi elektromagnetik [29]. Energi celah yang lebih kecil berkorelasi dengan serapan pada panjang gelombang yang lebih panjang.

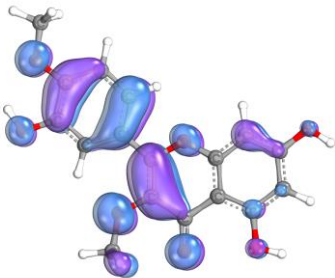
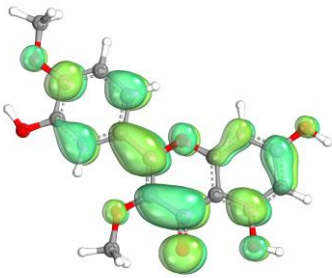
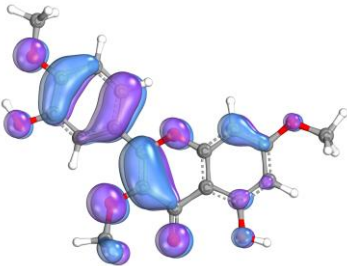
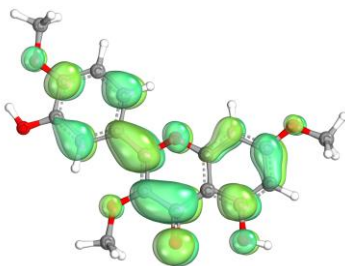
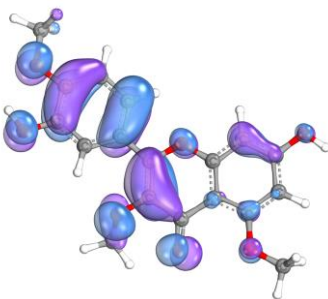
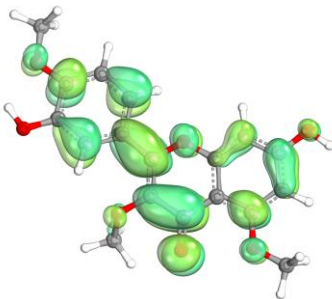
HOMO dan LUMO divisualisasikan dengan IboView. Berdasarkan visualisasi orbital pada Tabel 4, pengaruh letak gugus metoksi tidak mengubah bagian HOMO dan LUMO pada senyawa kuersetin. HOMO lebih dominan terdistribusi pada cincin B dan C. Hal ini berarti bahwa, sebelum eksitasi, kerapatan elektron terkonsentrasi pada sistem π cincin B dan C. Sebaliknya, LUMO terdistribusi merata pada seluruh sistem cincin terkonjugasi. Hasil visualisasi ini menunjukkan bahwa transisi elektronik HOMO ke LUMO menyebabkan delokalisasi kerapatan elektron dari cincin B dan C menuju ke seluruh sistem cincin terkonjugasi.

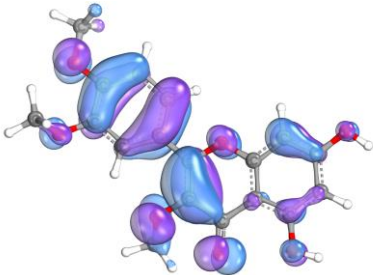
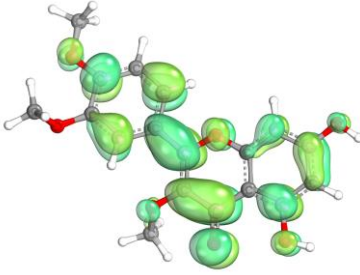
Hasil perhitungan menunjukkan substitusi atom H dengan metil pada gugus -OH di C1 menghasilkan energi celah yang paling rendah

dibandingkan di posisi lainnya. Berdasarkan hasil perhitungan, celah energi yang lebih rendah pada senyawa DMQ2m ($E_g = 3,747$ eV) dibandingkan DMQ3m ($E_g = 4,063$ eV), DMQ4m ($E_g = 4,074$

eV), dan nDMQ ($E_g = 4,036$ eV) mengindikasikan bahwa DMQ2m bersifat lebih reaktif [30]. Selain itu, senyawa DMQ2m dapat menyerap radiasi elektromagnetik pada panjang gelombang yang lebih panjang dibandingkan senyawa lainnya [17].

Tabel 4. Visualisasi Orbital HOMO dan LUMO pada senyawa turunan kuersetin

	HOMO	LUMO	E_g
nDMQ	 -5,416 eV	 -1,380 eV	4,036 eV
DMQ2m	 -5,111 eV	 -1,364 eV	3,747 eV
DMQ3m	 -5,408 eV	 -1,345 eV	4,063 eV

	HOMO	LUMO	E_g
DMQ4m	 -5,484 eV	 -1,410 eV	4,074 eV

KESIMPULAN

Struktur geometri teroptimasi dari senyawa turunan kuersetin telah dilakukan dengan metode DFT untuk mendapatkan struktur yang paling stabil. Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa substitusi gugus metoksi tidak mengubah panjang ikatan C-C dengan signifikan. Namun, substitusinya memengaruhi sudut dihedral cincin B pada senyawa turunan kuersetin akibat tolakan sterik gugus metoksi, terutama pada DMQ3m dan DMQ4m. Hasil analisis energi celah menunjukkan bahwa DMQ2m memiliki nilai E_g paling rendah (3,747 eV) dan paling mudah mengalami transisi elektronik dibandingkan DMQ3m (4,063 eV), DMQ4m (4,074 eV), dan nDMQ (4,036 eV). Hasil simulasi TD-DFT menunjukkan puncak absorpsi DMQ2m pada 343 nm (UV-A), DMQ3m pada 321 nm, dan DMQ4m pada 318 nm. Berdasarkan keseluruhan parameter yang dianalisis, DMQ2m direkomendasikan sebagai kandidat anti-UV-A paling potensial. Studi lanjutan berupa sintesis dan karakterisasi eksperimental diperlukan untuk memvalidasi hasil komputasi ini.

REFERENSI

- [1] M. Manganelli *dkk.*, "Skin Photodamage and Melanogenesis: A Comprehensive Review," *Cancers*, vol. 17, no. 11, hlm. 1784, Mei 2025, doi: 10.3390/cancers17111784.
- [2] D. McDaniel, P. Farris, dan G. Valacchi, "Atmospheric Skin Aging—Contributors and Inhibitors," *J of Cosmetic Dermatology*, vol. 17, no. 2, hlm. 124–137, Apr 2018, doi: 10.1111/jocd.12518.
- [3] L. Miligi, "Ultraviolet Radiation Exposure: Some Observations and Considerations,

Focusing on Some Italian Experiences, on Cancer Risk, and Primary Prevention," *Environments*, vol. 7, no. 2, hlm. 10, Jan 2020, doi: 10.3390/environments7020010.

- [4] M. Sharma, "Understanding the Impact of UV Radiation on Skin Health: Mechanisms, Risks, and Photoprotection Strategies," *IJHMP*, vol. 5, no. 1, hlm. 88–95, Mei 2024, doi:10.59551/IJHMP/25832069/2024.5.1.120.
- [5] D. Mitchell, "Revisiting the Photochemistry of Solar UVA in Human Skin," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 103, no. 37, hlm. 13567–13568, Sep 2006, doi: 10.1073/pnas.0605833103.
- [6] G. Mmbando, "Harnessing UV Radiation for Enhanced Agricultural Production: Benefits on Nutrition, Quality, and Sustainability," *All Life*, 2024, doi: 10.1080/26895293.2024.2381141.
- [7] R. P. Casadiego, "Observing the Absorption of Ultraviolet Radiation from the Sun by Oxygen from the Atmosphere as the Cause of Global Warming," *TAPR*, vol. 5, no. 3(67), hlm. 29–33, Okt 2022, doi: 10.15587/2706-5448.2022.266490.
- [8] P. Rettberg dan L. J. Rothschild, "Ultraviolet Radiation in Planetary Atmospheres and Biological Implications," dalam *Astrobiology*, G. Horneck dan C. Baumstark-Khan, Ed., Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2002, hlm. 233–243. doi: 10.1007/978-3-642-59381-9_16.
- [9] A. Adzhani, F. Darusman, dan A. Ratih, "Kajian Efek Radiasi Ultraviolet terhadap

- Kulit," *BCSP*, vol. 2, no. 2, Jul 2022, doi: 10.29313/bcsp.v2i2.3551.
- [10] S. Li, D. Liu, Y. Liu, B. Liu, dan X. Chen, "Quercetin and Its Mixture Increase the Stress Resistance of *Caenorhabditis elegans* to UV-B," *IJERPH*, vol. 17, no. 5, hlm. 1572, Feb 2020, doi: 10.3390/ijerph17051572.
- [11] T. Tripathy dan B. R. De, "Making Sense About Dipole Moments," 2008, Diakses: 4 Juli 2025. [Daring]. Tersedia pada: <https://ir.vidyasagar.ac.in/jspui/handle/123456789/765>
- [12] L. Tesalonika, T. W. Manurung, dan M. Ariefin, "Pemodelan Molekul untuk Pengaplikasian Senyawa Anti-UV dari Senyawa Kuersetin Menggunakan Pendekatan Semi Empiris," *Jurnal Sains dan Edukasi Sains*, vol. 7, no. 2, Art. no. 2, Agu 2024, doi: 10.24246/juses.v7i2p128-135.
- [13] M. D. Hanwell, D. E. Curtis, D. C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, dan G. R. Hutchison, "Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform," *J Cheminform*, vol. 4, no. 1, hlm. 17, Des 2012, doi: 10.1186/1758-2946-4-17.
- [14] G. Knizia, "Intrinsic Atomic Orbitals: An Unbiased Bridge between Quantum Theory and Chemical Concepts," *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 9, no. 11, hlm. 4834–4843, Nov 2013, doi: 10.1021/ct400687b.
- [15] F. Neese, "The ORCA Program system," *WIREs Computational Molecular Science*, vol. 2, no. 1, hlm. 73–78, 2012, doi: 10.1002/wcms.81.
- [16] T. Kanagasekaran, P. A. Praveen, K. Arulkannan, D. Saravanapriya, dan S. V. Bhat, "Comprehensive Analysis of DFT-3C Methods with B3LYP and Experimental Data to Model Optoelectronic Properties of Tetracene," *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2024, doi: 10.1016/j.mssp.2024.108159.
- [17] S. U. Sukmawati, "Analisis Aktivitas Antioksidan pada Tiga Senyawa Flavonoid dari Buah Jeruk Nipis Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan," *Analysis of Antioxidant Activity of Three Flavonoid Compounds from Lime Fruit Using Density Functional Theory*, Jul 2023, Diakses: 30 Juni 2025. [Daring]. Tersedia pada: <http://repository.ipb.ac.id/handle/123456789/121609>.
- [18] S. J. F. Antogia, A. L. Kilo, dan K. Sukamto, "Analisis Energi Adsorpsi dan HOMO-LUMO Nanopartikel Perak Ag₆ terhadap Fragmen Asam α -mikolat," *Jurnal Entropi*, vol. 20, no. 1, Art. no. 1, Jun 2025, doi: 10.37905/je.v20i1.32399.
- [19] M. Ariefin dan R. Alfanaar, "Molecular Modelling Based on TD-DFT Applied to UV Spectra of Coumarin Derivatives," *Walisongo Journal of Chemistry*, vol. 6, no. 1, hlm. 61–68, 2023.
- [20] S. L. Price, "Predicting crystal structures of Organic Compounds," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 43, no. 7, hlm. 2098–2111, 2014, doi: 10.1039/C3CS60279F.
- [21] M. G. Taylor *dkk.*, "Seeing Is Believing: Experimental Spin States from Machine Learning Model Structure Predictions," *J. Phys. Chem. A*, vol. 124, no. 16, hlm. 3286–3299, Apr 2020, doi: 10.1021/acs.jpca.0c01458.
- [22] Z. S. Herman, "Recent Advances in Simple Valence-Bond Theory and the Theory of Hybrid Bond Orbitals," *Int J of Quantum Chemistry*, vol. 23, no. 3, hlm. 921–943, Mar 1983, doi: 10.1002/qua.560230316.
- [23] Y. Qiu, D. Smith, C. Stern, M. Feng, dan L.-P. Wang, "Driving Torsion Scans with Wavefront Propagation," 1 April 2020. doi: 10.26434/chemrxiv.12044673.v1.
- [24] S. Charbonnier, S. T. Beguems, Y. T. N'Guessan, D. Legoff, A. Proutiere, dan R. Viani, "Dihedral Angle of Biphenyl Compounds Studied by Theoretical Calculations (Dipole Induced Dipole, Molecular Mechanics) and Experimental Methods (Electro-Optic Measurements, Infrared Spectroscopy)," *Journal of Molecular Structure*, vol. 158, hlm. 109–125, Mei 1987, doi: 10.1016/0022-2860(87)80009-1.
- [25] I. Bhat, S. Panda, N. N. Pati, dan P. Panda, "All-Aza meso-Benzo-Fused Triphyrins(2.1.1): Large Bathochromic Shift and Intensified Absorption via π -Extended

Conjugation.,” *Organic letters*, 2025, doi: 10.1021/acs.orglett.5c02150.

- [26] T. Z. Todorova, M. G. Traykov, A. V. Tadjer, dan Zh. A. Velkov, “Structure of flavones and flavonols. Part I: Role of substituents on the planarity of the system,” *Computational and Theoretical Chemistry*, vol. 1017, hlm. 85–90, Agu 2013, doi: 10.1016/j.comptc.2013.05.005.
- [27] J. S. Singh, Mohd. S. Khan, dan S. Uddin, “A DFT study of vibrational spectra of 5-chlorouracil with molecular structure, HOMO–LUMO, MEPs/ESPs and thermodynamic properties,” *Polym. Bull.*, vol. 80, no. 3, hlm. 3055–3083, Mar 2023, doi: 10.1007/s00289-022-04181-7.
- [28] T. Gould, Z. Hashimi, L. Kronik, dan S. Dale, “Single Excitation Energies Obtained from the Ensemble HOMO-LUMO Gap: Exact Results and Approximations,” 10 Januari 2022. doi: 10.26434/chemrxiv-2022-786fk.
- [29] H. A. Almashhadani, H. D. Alattabih, M. M. Kadhim, dan Z. M. Abbas, “Theoretical and Experimental Studies for Different Compounds to Calculate: Electronic Transfer, Energy Gap and NLO Properties,” *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, vol. 928, no. 7, hlm. 072010, Nov 2020, doi: 10.1088/1757-899X/928/7/072010.
- [30] K. I. Williamson, D. J. C. Herr, dan Y. Mo, “Mapping the Correlations Between Bandgap, HOMO, and LUMO Trends for Meta-Substituted Zn-MOFs,” *J Comput Chem*, vol. 45, no. 25, hlm. 2119–2127, Sep 2024, doi: 10.1002/jcc.27432.