

IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA

KOHERENSI VIBRASI MOLEKULAR X-H PADA SITUS AKTIF
ANTIOKSIDAN *TRANS*-RESVERATROL

SKRIPSI



RAYHAN FAKHRIZA MARDANA PUTRA

PROGRAM STUDI SARJANA FISIKA
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA

2022

IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA
LEMBAR PERNYATAAN SKRIPSI

SKRIPSI

Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Sains Bidang S1 FISIKA
Pada Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Airlangga

Oleh:

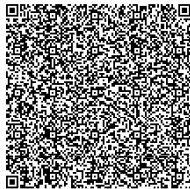
RAYHAN FAKHRIZA MARDANA PUTRA

081811333046

Tanggal Lulus:
18-08-2022

Disetujui Oleh:

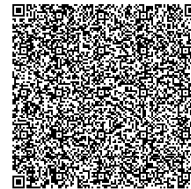
Pembimbing 1



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 197902062008011004

Pembimbing 2



Dr. Vera Khoirunisa, S.Si., M.T.

NIP. 19890831201932021

IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA
LEMBAR PENGESAHAN NASKAH SKRIPSI

Judul : Koherensi Vibrasi Molekular X-H pada Situs Aktif Antioksidan trans-Resveratrol
Penyusun : RAYHAN FAKHRIZA MARDANA PUTRA
NIM : 081811333046
Nama Pembimbing I : FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.
Nama Pembimbing II : Dr. Vera Khoirunisa, S.Si., M.T.
Tanggal Seminar : 18-08-2022 1:00 PM

Disetujui Oleh:

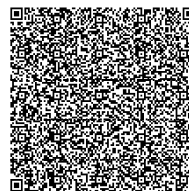
Pembimbing 1



FEBDIAN RUSYDI S.T., M.Sc., Ph.D.

NIP. 197902062008011004

Pembimbing 2



Dr. Vera Khoirunisa, S.Si., M.T.

NIP. 19890831201932021

Mengetahui,
Ketua Departemen Fisika
Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Airlangga



HERRI TRILAKSANA S.Si., M.Si., Ph.D

NIP. 197712282003121003

Penyusun persembahkan skripsi ini
untuk Mama dan Papa
Hj. Tri Ayu Srikandi, S.E.
dan **H. Friyandana Wijaya Marsuhud, S.E., M.M..**

Penyusun mengucapkan terima kasih
kepada Adik-Adik tercinta
Bintang Hanifian Syahadana
dan **Athira Ayu Haniya Andana Putri**

PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI

Skripsi ini tidak dipublikasikan, namun tersedia di perpustakaan dalam lingkungan Universitas Airlangga.

Skripsi ini diperkenankan untuk dipakai sebagai referensi kepustakaan, tetapi pengutipan harus seizin penyusun dan harus menyebutkan sumbernya sesuai kebiasaan ilmiah.

Dokumen skripsi ini merupakan hak milik Universitas Airlangga.

SURAT PERNYATAAN ORISINALITAS

Yang bertanda tangan di bawah ini, saya

Nama : Rayhan Fakhriza Mardana Putra

Nomor Induk Mahasiswa : 081811333046

Program Studi : S1- Fisika

Fakultas : Sains dan Teknologi

Jenjang : Strata-1 (S-1)

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan tindakan plagiat dalam penulisan naskah tugas akhir saya yang berjudul:

Koherensi Vibrasi Molekular X-H pada Situs Aktif Antioksidan *trans*-Resveratrol

Apabila suatu saat saya terbukti melakukan tindakan plagiat, maka saya bersedia menerima sanksi yang telah ditetapkan

Surabaya, 26 Agustus 2022

Penulis,

A handwritten signature in black ink, reading 'R. Fakhriza', is written over a square QR code. To the left of the QR code is a circular stamp with a yellow border and a red center, containing the text 'MEMERAI 1000' and '1000'.

Rayhan Fakhriza Mardana Putra

NIM.081811333046

PRAKATA

Studi ini merupakan skripsi (tugas akhir) sebagai syarat kelulusan di program studi S1-Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga. Tugas akhir ini berbobot 6 sks dan didahului oleh proposal skripsi berbobot 2 sks.

Studi ini mempelajari koherensi vibrasi molekular X–H terhadap energi disosiasi hidrogen molekul *trans*-Resveratrol. Besaran energi disosiasi hidrogen dan frekuensi vibrasi molekular diperoleh dari kalkulasi optimisasi berbasis *Density Functional Theory* (DFT) dan kalkulasi frekuensi berbasis *post*-DFT. Disosiasi atom hidrogen pada molekul-molekul sederhana dipelajari terlebih dahulu sebelum mempelajari molekul *trans*-Resveratrol. Koherensi moda vibrasi terhadap energi disosiasi hidrogen kemudian dipelajari dengan potensial morse.

Dokumen ini terdiri dari lima bagian. Bab 1 memaparkan latar belakang studi, pertanyaan ilmiah, rumusan masalah, tujuan, batasan masalah, dan manfaat studi. Bab 3 berfokus pada metode untuk menjawab tujuan. Bab 4 menunjukkan hasil dari metode disertai pembahasan. Bab 5 memaparkan kesimpulan studi dan saran. Sedangkan, Bab 2 memaparkan tinjauan pustaka yang digunakan dalam tugas akhir ini. Dokumen ini disertai dengan lampiran yang menunjukkan rutin kalkulasi serta data-data yang diperoleh pada studi ini.

Semoga studi ini dapat memberikan manfaat bagi civitas akademika Universitas Airlangga.

Tabik,

Rayhan Fakhriza Mardana Putra.

LEMBARAN TERIMA KASIH

Penyusun mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang terlibat dalam penyelesaian tugas akhir ini. Penyusun *harus* mengucapkan terima kasih secara khusus kepada pihak-pihak atas kontribusi yang signifikan dalam penyelesaian tugas akhir ini.

1. Dr. Febdian Rusydi selaku guru dan pembimbing I yang senantiasa mencurahkan waktu, tenaga, dan pikirannya untuk mendidik penyusun serta memberikan ide, bimbingan, dan arahan kepada penyusun hingga tugas akhir ini selesai.
2. Dr. Vera Khoirunisa selaku pembimbing II yang telah memberikan bimbingan dan arahan kepada penyusun dalam penyelesaian tugas akhir ini.
3. Dr. Andi Hamim Zaidan selaku penguji I yang telah memberikan kritik dan saran yang membangun kepada penyusun.
4. Para senpai yang telah membagikan pemahaman dan bantuan kepada penyusun dalam penyelesaian tugas akhir ini.
5. Kevin Yusuf Brilliantama, Melani Yulia Sianggi, dan Alfaya Putri Farikha, kawan seperjuangan yang telah berjuang bersama penyusun.
6. Rivendellian yang telah memberikan dukungan tenaga dan informasi dalam penyelesaian tugas akhir.
7. Kawan-kawan Lambda fisika angkatan 2018 yang telah memberikan dukungan dan informasi dalam penyelesaian tugas akhir
8. Erlangga Firdaus, Ferry Agusta, dan Rizky Fajar yang senantiasa memberikan dukungan dan menjalin silaturahmi dengan penyusun.

ABSTRAK

Tugas akhir ini mempelajari koherensi vibrasi molekular X-H terhadap energi disosiasi atom hidrogen pada molekul *trans*-Resveratrol. Molekul *trans*-Resveratrol dikenal dengan kemampuannya sebagai antioksidan. Antioksidan bekerja menetralkan radikal bebas dengan melepaskan atom hidrogen. Besaran *Hydrogen Dissociation Energy* (HDE) menyatakan energi yang diperlukan untuk melepaskan atom hidrogen. Potensial Morse menyatakan semakin tinggi frekuensi vibrasi maka semakin rendah nilai HDE. Tugas akhir ini bertujuan untuk mengevaluasi moda-moda vibrasi molekular energi disosiasi atom hidrogen dalam *trans*-Resveratrol. Besaran moda-moda vibrasi dan energi disosiasi atom hidrogen diperoleh dari kalkulasi berbasis *Density Functional Theory*. Hasil kalkulasi menunjukkan ikatan H–O–C pada *trans*-Resveratrol memiliki nilai HDE yang rendah dengan frekuensi vibrasi yang tinggi. Sedangkan ikatan H–C–siklik dan H–siklik memiliki nilai HDE yang tinggi dengan frekuensi vibrasi yang rendah. Dengan demikian, koherensi vibrasi molekular X-H terhadap energi disosiasi atom hidrogen pada molekul *trans*-Resveratrol sesuai dengan potensial Morse.

Kata kunci : Vibrasi molekular, *Hydrogen Dissociation Energy*, *Density Functional Theory*.

ABSTRACT

This final task study the coherence of X-H molecular vibration and the hydrogen atom dissociation energy on *trans*-Resveratrol molecule. *Trans*-Resveratrol molecule is known with ability as an antioxidant. Antioxidant neutralize radical by dissociate the hydrogen atom. The Hydrogen Dissociation Energy (HDE) describes the energy necessary to dissociate hydrogen atom. Morse potential explain that the higher molecular vibration frequency, the lower Hydrogen Dissociation Energy becomes. The goal of this final task is to evaluate the vibrational modes to the HDE in *trans*-Resveratrol. The vibrational modes and HDE is obtained by Density Functional Theory-based calculation. The calculation results shows that the H–O–C bond in *trans*-Resveratrol has the lowest HDE with the highest molecular vibration frequency. Whereas the H–C–cyclic and the H–cyclic bond in *trans*-Resveratrol has the highest HDE with the lowest molecular vibration frequency. Therefore, the coherence of X-H molecular vibration and the hydrogen atom dissociation energy on *trans*-Resveratrol is in good agreement with the Morse Potential.

Keywords : Molecular vibration, *Hydrogen Dissociation Energy*, *Density Functional Theory*.

DAFTAR ISI

Halaman Pernyataan	i
Halaman Pernyataan	i
Lembaran Pengesahan	ii
Pedoman Penggunaan Skripsi	iv
Pernyataan Orisinalitas	v
Prakata	vi
Lembaran Terima Kasih	vii
Abstrak	viii
Abstract	ix
1 Pendahuluan	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Pertanyaan Ilmiah	2
1.3 Rumusan Masalah	3
1.4 Tujuan	3
1.5 Batasan Masalah	3
1.6 Manfaat	4
2 Tinjauan Pustaka	5
2.1 Disosiasi Atom	5
2.1.1 Persamaan Reaksi Disosiasi Atom	5
2.1.2 Molekul Studi Kasus	6
2.2 Gerak vibrasi	11
2.2.1 Hukum Hooke	11
2.2.2 Energi pada Gerak Osilasi	11
2.3 Mekanika Kuantum	13
2.3.1 Persamaan Schrödinger	13

<i>DAFTAR ISI</i>	xi
2.3.2 Persamaan Schrödinger Tak Bergantung Waktu	14
2.3.3 Potensial	15
2.4 Moda-Moda Vibrasi	22
2.5 Studi Kasus Kalkulasi Berbasis Moda Vibrasi	24
3 Metode Tugas Akhir	26
3.1 Langkah Kerja	26
3.2 Waktu dan Tempat Pengerjaan Tugas Akhir	30
4 Hasil dan Pembahasan	31
4.1 Geometri Keadaan Dasar	31
4.2 Energi Elektronik	39
4.3 Frekuensi	42
4.4 <i>Hydrogen Dissociation Energy</i> (HDE)	48
4.5 Grafik HDE(v)	50
4.5.1 Molekul Diatomik	50
4.5.2 Molekul CH ₃ dan H ₂ O	51
4.5.3 Molekul Sederhana	52
4.5.4 Molekul Siklik Sederhana	53
4.5.5 Molekul Aromatik	55
4.5.6 Molekul <i>trans</i> -Resveratrol	56
5 Kesimpulan dan Saran	59
5.1 Kesimpulan	59
5.2 Saran	60
Bibliografi	61
Lampiran A. Implementasi DFT dalam Gaussian	63
Lampiran B. Rutin Kalkulasi	66
Lampiran C. Parameter Geometri Molekul Hipotetis	105
Lampiran D. Energi Seluruh Molekul	112
Lampiran E. Moda-Moda Vibrasi	118
Lampiran F. Hasil Perhitungan HDE	130

DAFTAR GAMBAR

1.1	Grafik Kosong HDE vs. Frekuensi Vibrasi Molekuler	3
2.1	Molekul Diatomik (a) CH dan (b) OH.	6
2.2	Molekul (a) CH ₃ dan (b) H ₂ O.	7
2.3	Molekul (a) C ₂ H ₆ , (b) C ₂ H ₆ O, (c) C ₂ H ₄ , (d) C ₂ H ₄ O, (e) C ₂ H ₂ , dan (f) C ₂ H ₂ O.	7
2.4	Molekul (a) C ₃ H ₄ , (b) C ₃ H ₄ O, (c) C ₄ H ₆ , (d) C ₄ H ₆ O, (e) C ₅ H ₈ , dan (f) C ₅ H ₈ O.	8
2.5	Molekul Aromatik (a) C ₆ H ₆ , (b) C ₆ H ₆ O, dan (c) C ₇ H ₈	9
2.6	Molekul <i>trans</i> -Resveratrol	10
2.7	Kurva energi potensial dan energi kinetik pada sistem berosi- lasi. Garis kurva oranye merupakan kurva energi potensial. Sedangkan garis kurva biru merupakan kurva energi kinetik. (Gambar diambil dari Halliday et al. Figure 13.9)	12
2.8	Potensial sumur tak hingga	17
2.9	Potensial Osilator Harmonik. Gambar diambil dari buku karya Atkins and Paula Figure 8.18	18
2.10	Grafik Potensial Morse. Gambar diambil dari buku karya Atkins and Paula Figure 12.26	20
2.11	Kurva potensial Morse yang menunjukkan koherensi antara en- ergi disosiasi dengan frekuensi vibrasi	22
2.12	Moda-moda vibrasi pada molekul air, (a) <i>bending</i> , (b) <i>stretch-</i> <i>ing</i> , (c) <i>stretching</i>	24
3.1	Diagram alir langkah kerja tugas akhir	29
4.1	Molekul siklik non-hipotetik sederhana, (a) cyclopropene, (b) cyclobutene, (c) cyclopentene	32
4.2	Molekul (a) benzene, (b) fenol, (c) toluene	33

4.3	Molekul <i>trans</i> -Resveratrol. Identitas berupa angka (1-6) dan (1'-6') diberikan pada atom-atom karbon (C) penyusun molekul <i>trans</i> -Resveratrol. Identitas atom-atom berdasar pada publikasi karya Khoirunisa et al. yang berjudul "The Significance of Long-Range Correction to the Hydroperoxyl Radical-scavenging of <i>trans</i> -Resveratrol and Gnetin-C"	33
4.4	<i>Energy Level Diagram</i> (ELD) keadaan <i>spin</i> yang berbeda untuk dua belas molekul non-hipotetik. Sumbu <i>x</i> menyatakan dua belas molekul nonhipotetis, sumbu <i>y</i> menyatakan energi relatif (E_r , dengan satuan <i>eV</i>)	40
4.5	Moda vibrasi molekul (a) CH dan (b) OH	42
4.6	Moda vibrasi yang digunakan pada molekul (a) CH ₃ dan (b) H ₂ O	43
4.7	Moda vibrasi yang digunakan pada molekul (a) C ₂ H ₆ , (b) C ₂ H ₄ , dan (c) C ₂ H ₂	43
4.8	Moda vibrasi yang dipilih pada molekul (a,b) C ₃ H ₄ , (c,d) C ₄ H ₆ , dan (e,f) C ₅ H ₈	44
4.9	Moda vibrasi yang digunakan pada molekul (a) C ₆ H ₆ atau benzena, (b,c) C ₆ H ₆ O atau fenol, dan (d,e) C ₇ H ₈ atau toluene.	45
4.10	Empat moda vibrasi pertama yang digunakan pada molekul <i>trans</i> -Resveratrol.	46
4.11	Grafik HDE terhadap Frekuensi Vibrasi Molekul Diatomik	50
4.12	Grafik HDE terhadap Frekuensi Vibrasi Molekul CH ₃ dan H ₂ O	51
4.13	Grafik HDE terhadap Frekuensi Vibrasi Molekul Linear Sederhana	52
4.14	Grafik HDE terhadap Frekuensi Vibrasi Molekul Siklik Sederhana	53
4.15	Grafik HDE terhadap Frekuensi Vibrasi Molekul Aromatik C ₆ H ₆ , C ₆ H ₆ O, dan C ₇ H ₈	55
4.16	Grafik HDE terhadap Frekuensi Vibrasi Molekul <i>trans</i> -Resveratrol	56
1	Rutin kalkulasi molekul <i>trans</i> -Resveratrol	65

DAFTAR TABEL

3.1	Agenda dan waktu pengerjaan tugas akhir	30
4.1	Parameter geometri pilihan untuk molekul non-hipotetik sederhana pada <i>ground state</i> , panjang ikatan (R, dengan satuan Å), sudut ikatan (A, dengan satuan derajat), $\Delta = kalk. - eksp. $.	35
4.2	Parameter geometri pilihan untuk molekul siklik non-hipotetik sederhana pada <i>ground state</i> , panjang ikatan (R, dengan satuan Å), sudut ikatan (A, dengan satuan derajat), sudut dihedral (D, dengan satuan derajat). Penamaan atom penyusun molekul berikut disesuaikan dengan Gambar 4.1	36
4.3	Parameter geometri pilihan untuk molekul benzene, fenol, dan toluene pada <i>ground state</i> , panjang ikatan (R, dengan satuan Å), sudut ikatan (A, dengan satuan derajat). Penamaan atom penyusun molekul berikut disesuaikan dengan Gambar 4.2	37
4.4	Parameter geometri pilihan molekul <i>trans</i> -Resveratrol pada <i>ground state</i> , panjang ikatan (R, dengan satuan Å), sudut ikatan (A, dengan satuan derajat), sudut dihedral (D, dengan satuan derajat). Penamaan atom penyusun molekul disesuaikan dengan Gambar 4.3	38
4.5	Tabel energi molekul-molekul netral dengan keadaan spin yang berbeda, warna biru menunjukkan keadaan spin yang lebih stabil.	41
4.6	Hasil perhitungan HDE untuk seluruh molekul nonhipotetis.	49