

THEORETICAL STUDY OF HYDROXY CHALCONE SUBSTITUTED WITH ELECTRON-DONATING AND ELECTRON-WITHDRAWING GROUPS AS CHEMOSENSOR FOR VARIOUS ANIONS

Fitra Perdana
14/373261/PPA/04771

ABSTRACT

Theoretical study had been carried out to investigate interaction between hydroxy chalcone derivatives substituted with electron-donating and electron-withdrawing substituents as chemosensors with F^- , Cl^- , Br^- , CN^- , CH_3COO^- , NO_3^- , HCO_3^- and HSO_4^- anions. This study was aimed to design molecular structures of chemosensor hydroxy chalcone properties for the anions and their interaction models. Geometry optimization of the hydroxy chalcone-anions was theoretically studied using DFT/B3LYP/6-31G(d,p). The results, both bond length of O-H and interaction energies were further analyzed to investigate the interaction model of hydroxy chalcone-anion. Furthermore, electronic transition of sensor hydroxy chalcone was analyzed to observe the energy change of HOMO-LUMO and their UV-visible spectra were also predicted using TD-DFT/B3LYP/6-31G(d,p)/PCM method with addition of DMSO and methanol solvent.

The result of geometry optimization showed 0,46-0,85 Å O-H bond elongation of the hydroxy chalcone was occurred by F^- , CN^- , CH_3COO^- , and HCO_3^- . It was indicated deprotonation of sensor hydroxy chalcone by anions. Where as the interaction of the hydroxy chalcone with Cl^- , Br^- , NO_3^- and HSO_4^- just formed an hydrogen bond with 0,04-0,10 Å O-H bond elongation. Sensor hydroxy chalcone substituted with electron-withdrawing group had resulted longer O-H bond elongation than hydroxy chalcone substituted with electron-donating group. Deprotonized sensor hydroxy chalcone had more energy change of interaction (-205,32 – -438,47 kJ/mol) than sensor which just formed the hydrogen bond (-75,81 – -158,88 kJ/mol). Deprotonized sensor caused reduction of the difference of HOMO-LUMO energy from -3,94 – -4,06 eV to -2,62 – -2,75 eV and absorption of UV-visible prediction to greater wavelength (419-468 nm).

Keywords: Chemosensor, hydroxy chalcone, anion, DFT

STUDI TEORITIS SENYAWA TURUNAN KALKON HIDROKSI TERSUBSTITUSI GUGUS PEMBERI DAN PENARIK ELEKTRON SEBAGAI SENSOR KIMIA BERBAGAI ANION

Fitra Perdana
14/373261/PPA/04771

INTISARI

Kajian secara teoritis telah dilakukan untuk mempelajari interaksi senyawa turunan kalkon hidroksi dengan gugus pemberi dan penarik elektron sebagai sensor kimia dengan anion F^- , Cl^- , Br^- , CN^- , CH_3COO^- , NO_3^- , HCO_3^- dan HSO_4^- . Penelitian ini bertujuan untuk memodelkan struktur molekul senyawa kalkon hidroksi dan sifat sensornya serta model interaksinya dengan anion. Optimasi geometri struktur molekul kalkon hidroksi-anion dilakukan dengan metode DFT/B3LYP/6-31G(d,p). Hasil optimasi berupa panjang ikatan O-H dan energi interaksi dianalisis untuk melihat model interaksi sensor kalkon hidroksi-anion. Selain itu, juga dilakukan analisis transisi elektronik sensor kalkon hidroksi untuk melihat perubahan energi HOMO-LUMO dan prediksi spektra UV-Visibel menggunakan metode TD-DFT/B3LYP/6-31G(d,p)/PCM dengan penambahan pelarut DMSO dan metanol.

Hasil optimasi geometri menunjukkan terjadinya pemanjangan ikatan O-H sebesar 0,46-0,85 Å. Hal ini mengindikasikan terjadinya deprotonasi sensor kalkon hidroksi oleh anion. Sedangkan interaksi sensor kalkon hidroksi dengan anion Cl^- , Br^- , NO_3^- dan HSO_4^- hanya berupa ikatan hidrogen dengan pemanjangan ikatan O-H sebesar 0,04-0,10 Å. Perpanjangan ikatan O-H pada sensor kalkon hidroksi dengan penambahan gugus penarik elektron terjadi lebih besar. Sensor kalkon hidroksi yang mengalami deprotonasi memiliki energi interaksi yang lebih besar yaitu -49,07 – -105,41 kkal/mol dibandingkan sensor yang hanya membentuk ikatan hidrogen yaitu -18,12 – 37,97 kkal/mol. Sensor yang mengalami deprotonasi mengakibatkan turunnya selisih energi HOMO-LUMO dari -3,94 – -4,06 eV menjadi -2,62 – -2,75 eV dan absorpsi prediksi sinar UV-Visibel pada panjang gelombang yang lebih besar yaitu 419-468 nm.

Kata kunci: Sensor kimia, kalkon hidroksi, anion, DFT