



STUDI TRANSISI ELEKTRONIK SENYAWA ANTOSIANIDIN-3-GLIKOSIDA SEBAGAI KANDIDAT PIGMEN ALAMI

Muhammad Ikhlas Abdjan dan Khusna Arif Rakhman

Program Studi Pendidikan Kimia, FKIP, Universitas Khairun, Ternate
Jln. Bandara Babullah Kampus I Unkhair, Akehuda Ternate Utara
E-mail: khusna.arif.rakhman@gmail.com

Abstrak

Pemodelan senyawa antosianidin-3-glikosida sebagai kandidat pigmen alami telah dilakukan dengan cara optimasi geometri dan simulasi transisi elektronik menggunakan program *Hyperchem 8.0.10*. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan potensi senyawa antosianidin-3-glikosida sebagai pigmen alami melalui perbandingan serapan panjang gelombang secara eksperimen dan secara komputasi. Hasil optimasi geometri molekul antosianidin-3-glikosida menggunakan metode semi empirik PM3 menunjukkan energi total sebesar -135721.5 (kcal/mol). Studi transisi elektronik senyawa antosianidin-3-glikosida menggunakan metode semi empirik ZINDO/s yang menunjukkan transisi elektronik dengan nilai intensitas paling besar yakni pada panjang gelombang tampak, yaitu 425.5 nm (1.1233). Tingkatan orbital molekul yang terbaca sebanyak 6 orbital, yakni HOMO (80, 81, 82) dan LUMO (83, 84, 85) dengan 2 tipe pergeseran transisi elektronik $n \rightarrow \pi^*$ dan $\pi \rightarrow \pi^*$. Senyawa antosianidin-3-glikosida memiliki karakteristik sebagai pigmen alami, dimana telah dilakukan eksperimen terukur pada λ_{maks} sebesar 520 nm dan simulasi ZINDO/s yang menunjukkan karakteristik warna biru-ungu.

Kata kunci: Antosianidin-3-glikosida, pigmen alami, studi transisi elektronik.

PENDAHULUAN

Penentuan kandungan pigmen suatu senyawa antosianin yang terkandung dalam tumbuhan dapat dilakukan dengan cara isolasi melalui metode ekstraksi, maserasi dan sokletasi [1, 2]. Pemilihan pelarut yang baik menentukan seberapa efektif dan akuratnya penentuan senyawa antosianin terhadap identifikasi pigmen melalui absorptivitas molarnya [3]. Penelitian mengenai penentuan pigmentasi senyawa turunan antosianin tumbuhan seperti jantung pisang dan buah berry pernah dilakukan menggunakan cara isolasi yang diukur dengan variasi variabel seperti pH, suhu dan jenis turunan senyawa antosianin [4, 5].

Penelitian Antosianin termaksud dalam grup senyawa flavonoid yang

memberikan warna pada berbagai macam bunga, sayuran, buah-buahan dengan interaktif warna merah, orange dan biru, dimana dapat dijadikan sebagai sumber pewarna alami pada makanan [6]. Ketertarikan penelitian terhadap potensi aktivitas senyawa antosianin sebagai pewarna alami telah banyak dilakukan dengan variasi penelitian yang berbeda. Pemanfaatan pewarna alami senyawa antosianin dapat diaplikasikan pada makanan, obat-obatan dan pabrik tekstil [7]. Salah satu turunan senyawa antosianin yang paling banyak ditemui dan digunakan dalam penelitian sebagai sumber pigmen alami dari tumbuhan adalah antosianidin-3-glikosida (8-11).

Interaksi zat warna dengan radiasi elektromagnetik terjadi pada daerah ultraviolet UV (190-400 nm) dan daerah visibel/tampak (400-800 nm) dengan warna kontras yang dapat dilihat [12]. Secara umum, klasifikasi panjang gelombang berdasarkan daerah UV serapan radiasi elektromagnetik terdiri atas UV-A, UV-B dan UV-C. Interaksi zat pewarna senyawa antosianidin dapat diukur dan dianalisis pergeseran panjang gelombangnya secara spektrofotometri UV-Vis melalui absorbansi radiasi elektromagnetik [13, 14]. Pergeseran panjang gelombang tersebut menyebabkan munculnya peak/puncak yang menandakan terjadinya transisi elektronik yang dapat dipelajari melalui pendekatan eksperimen ataupun simulasi secara komputasi [15].

METODE

Pemodelan senyawa antosianidin-3-glikosida dibuat dalam bentuk molekul 3D dan dioptimasi geometrinya menggunakan metode semi empiris *Parameterized Model 3/PM3* [20]. Optimasi geometri molekul tersebut dilakukan dengan tujuan untuk mencari struktur molekul yang optimal dengan nilai energi total yang terkecil [21]. Optimasi geometri molekul dilakukan menggunakan parameter, yaitu dengan batas gradient perubahannya sebesar $0,1 \text{ kkal}/(\text{\AA} \cdot \text{mol})$ mencapai batas gradien sekawan berdasarkan metoda Polak-Ribiere.

Pemodelan terhadap struktur hasil optimasi geometri dari metode semi empiris PM3, dilanjutkan dengan perhitungan single point *configuration interaction* (CI) menggunakan metode semi empiris ZINDO/s [22]. Kemudian, parameter-parameter yang digunakan, yaitu perhitungan orbital dengan batasan

Penelitian mengenai pemodelan senyawa yang dimodelkan melalui simulasi secara komputasi telah banyak dilakukan yang bertujuan memperoleh informasi secara kuantitatif melalui metode-metode perhitungan secara komputasi [16, 17, 18]. Salah satunya adalah upaya pemodelan interaksi senyawa antosianidin-3-glikosida untuk mempelajari potensinya sebagai zat pewarna alami. Pemodelan interaksi tersebut dapat tuangkan secara deskriptif melalui perhitungan secara kuantitatif yang dapat dilakukan menggunakan metode semi empirik ZINDO/s. Dimana, metode tersebut mampu mensimulasikan terjadinya pergeseran panjang gelombang berupa spektrum yang kemudian dapat dijelaskan terjadinya transisi elektronik pada tingkat orbital molekul [19].

eksitasi tunggal (*singly excited-CI*) dengan orbital HOMO-LUMO masing-masing 3. Data hasil perhitungan spektra disajikan berupa diagram spektra diskontinyu untuk daerah serapan UV, dimana data ini selanjutnya digunakan untuk menganalisis transisi elektronik senyawa antosianidin-3-glikosida.

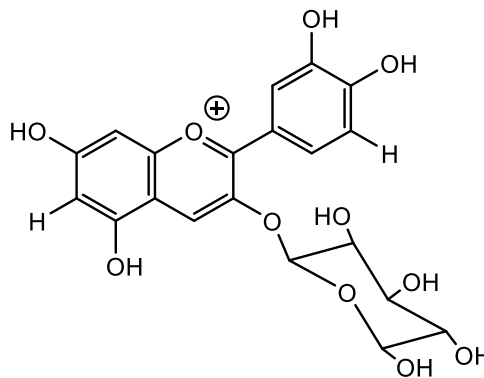
Karakterisasi senyawa antosianidin-3-glikosida sebagai zat pewarna alami ditentukan melalui perbandingan penyerapan panjang gelombang pada daerah UV-Vis yang dilakukan secara eksperimen dan komputasi. Dimana, data spektra secara eksperimen yang dipakai adalah senyawa antosianin yang terkandung dalam ubi jalar ungu pada penelitian sebelumnya yang telah dilakukan [23]. Sementara itu, data spektra secara komputasi didapat dari hasil simulasi spektrum diskontinyu menggunakan metode semi empirik ZINDO/s.

HASIL PENELITIAN

Optimasi Geometri Molekul Antosianidin-3-Glikosida

Pemodelan struktur molekul turunan senyawa antosianin, yaitu antosianidin atau sianidin dibuat berdasarkan struktur dasarnya (kation Flavilium) yang diganti dengan gugus fungsinya, yaitu R1, R2, R4, R5, R7 = OH dan R3, R6 = H [24]. Struktur molekul antosianidin-3-glikosida

terdiri atas molekul bukan gula sianidin (aglikon) dan molekul gula/glukosa (glikon) melalui ikatan eliminasi air pada atom oksigen (O) tepatnya pada gugus R7 [25]. Dimana, ikatan antara aglikon dengan glikol tersebut dikenal dengan hidrolisis dan membentuk senyawa antosianidin-3-glikosida (Gambar 1).



Gambar 1. Struktur Antosianidin-3-Glikosida

Tabel 1. Data Optimasi Geometri Antosianidin-3-Glikosida Menggunakan Metode PM3

No.	Parameter	Nilai
1.	Total energi (kcal/mol)	-135721.5578941
2.	Energi ikatan (kcal/mol)	-5294.3302051
3.	Panas Pembentukan (kcal/mol)	-231.4432051

Optimasi geometri molekul antosianidin-3-glikosida dilakukan menggunakan metode semi empiris PM3 yang terdapat pada paket program *Hyperchem 8.0.10*. Hasil yang didapat dari optimasi molekul antosianidin-3-glikosida berupa data perhitungan energi dan muatan masing-masing atom yang berikatan dalam membentuk molekulnya. Perhitungan energi pada molekul antosianidin-3-glikosida terdiri atas total energi, energi ikatan dan panas pembentukan (Tabel 1).

Energi ikatan dan panas pembentukan merupakan respentatif dari salah satu sekian banyak parameter yang digunakan untuk mendapatkan energi total suatu molekul. Energi total menunjukkan seberapa besar energi yang dibutuhkan oleh suatu molekul untuk dapat terbentuk berdasarkan interaksi antara atom-atom penyusunnya, dimana energi total dari hasil optimasi geometri yang mendekati nol menunjukkan keadaan yang relative lebih stabil [26].

Tabel 2. Nilai Muatan Antosianidin-3-Glikosida Menggunakan Metode PM3

Atom	Muatan (eV)	Atom	Muatan (eV)
qC1	0.257974	qO26	-0.334735
qC2	-0.225697	qO27	-0.285184
qC3	0.157754	qO28	-0.310522
qC4	-0.213549	qO29	-0.295990
qC5	0.251085	qH30	0.166865
qC6	-0.322605	qH31	0.144768
qO7	-0.034399	qH32	0.168022
qC8	0.300310	qH33	0.155130
qC9	-0.062929	qH34	0.135604
qC10	0.102353	qO35	-0.207153
qC11	-0.168071	qH36	0.222676
qC12	-0.006137	qH37	0.229363
qC13	-0.045698	qH38	0.084049
qC14	0.056210	qH39	0.096696
qC15	0.124569	qH40	0.076551
qC16	-0.183221	qH41	0.094915
qO17	-0.184882	qH42	0.079140
qO18	-0.200231	qH23	0.209867
qO19	-0.166979	qH44	0.195385
qC20	0.173587	qH45	0.209764
qC21	0.036625	qH46	0.203948
qC22	0.018268	qO47	-0.213741
qC23	0.001397	qH48	0.132283
qC24	0.204261	qH49	0.222269
qO25	-0.278485	qH50	0.228521

Optimasi geometri molekul senyawa Antosianidin-3-Glikosida melibatkan 50 atom (oksigen, karbon dan hidrogen) dan 164 elektron. Harga muatan (eV) total dari senyawa Antosianidin-3-Glikosida adalah +1 dari jumlah keseluruhan muatan peratom yakni, dimana hasil perhitungan optimasi geometri menggunakan metode

semi empirik PM3 (Tabel 2). Perbedaan nilai muatan tersebut disebabkan karena perbedaan keelektronegatifan masing-masing atom yang berikatan dalam molekul tersebut [27]. Atom O memiliki elektronegatifitas lebih besar dibandingkan dengan atom C dan H yang mampu menarik elektron kearahnya, sehingga

semua atom atom O memiliki nilai muatan negatif. Sedangkan, atom H memiliki elektronegatifitas yang paling lemah dibandingkan atom C dan O, sehingga semua atom H memiliki nilai muatan positif. Sementara itu, untuk kasus atom C memiliki nilai muatan negatif maupun positif, hal ini dikarenakan dipengaruhi oleh atom-atom dengan perbedaan elektronegativitas yang berikatan disekitarnya [28].

Transisi Elektronik

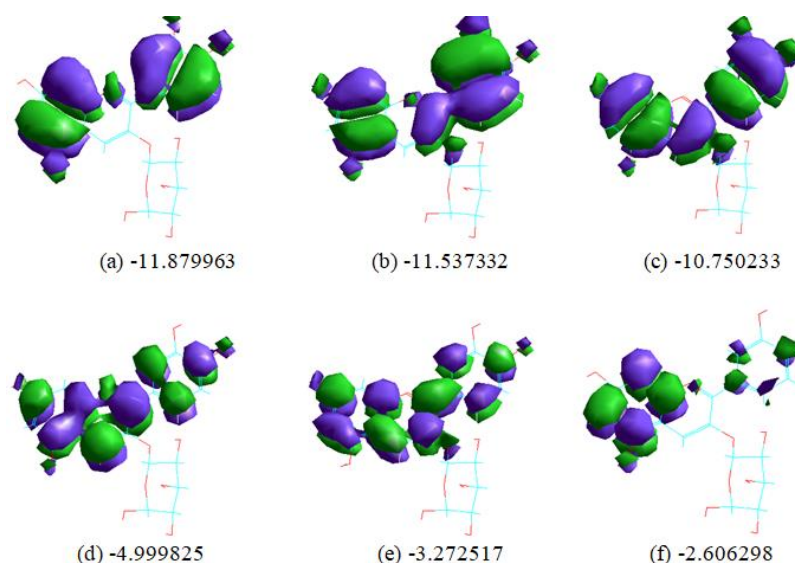
Studi transisi elektronik terhadap senyawa Antosianidin-3-Glikosida dilakukan menggunakan metode semi empirik ZINDO/s dengan melibatkan 143 orbital. Parameter-parameter yang diukur dalam simulasi tersebut, yaitu terdiri atas panjang gelombang (λ), intensitas, momen dipol (D), tingkatan molekul orbital, energi HOMO dan energi LUMO. Hasil simulasi ZINDO/s untuk senyawa Antosianidin-3-Glikosida didapat 6 peak/puncak transisi

dari 18 transisi. Transisi elektronik dengan puncak tertinggi memiliki nilai intensitas paling besar yakni pada panjang gelombang visibel 425.5 nm (1.1233) dan transisi elektronik pada daerah Ultraviolet terbaca sebanyak 5 peak/puncak (Tabel 3). Sementara itu, Harga moment dipol mempunyai harga menunjukkan tingkat polaritas suatu senyawa yang terlarut [29].

Tipe transisi elektronik pada senyawa Antosianidin-3-Glikosida menunjukkan 2 tipe transisi, yaitu $n \rightarrow \pi^*$ dan $\pi \rightarrow \pi^*$. Dimana, transisi $n \rightarrow \pi^*$ terjadi karena terdapat gugus kromofor ikatan terkonjugasi sederhana pada 3 cicin aromatic (C=C) dalam senyawa antosianidin. Selain itu, transisi $\pi \rightarrow \pi^*$ terjadi karena adanya gugus substitusi, seperti -OH, -H dan glukosa yang merupakan gugus auksokrom sehingga mempengaruhi pergeseran panjang gelombang pada senyawa Antosianidin-3-Glikosida.

Tabel 3. Hasil Simulasi Molekul Antosianidin-3-Glikosida Menggunakan ZINDO/s

λ (nm)	Intensitas	Moment Dipol	Tingkatan MO	ΔE_g (eV)	Tipe Transisi
452.5	1.1233	3.7461	82→83	-5.750408	$n \rightarrow \pi^*$
267.5	0.3305	3.1341	82→84	-7.477716	$n \rightarrow \pi^*$
227.3	0.2618	3.1513	82→85	-8.143935	$\pi \rightarrow \pi^*$
			81→84	-8.264815	
218.1	0.3361	8.9231	81→84	-8.264815	$\pi \rightarrow \pi^*$
			80→84	-8.607446	
			81→85	-8.931034	
200.4	0.3566	8.7562	80→85	-9.273665	$\pi \rightarrow \pi^*$
			81→85	-8.931034	
185.7	0.1584	20.3405	80→85	-9.273665	$\pi \rightarrow \pi^*$



Gambar 2. Tingkatan OM Antosianidin-3-Glikosida (a), (b), (c) HOMO 80, 81, 82 dan (d), (e), (f) LUMO 83, 84, 85

Tingkatan molekuler orbital menunjukkan tempat terjadinya eksitasi elektron dari HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbitals*) ke LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbitals*), dimana selisi energi gap (ΔE_g) akan mempengaruhi kemudahan suatu elektron tereksitasi dari HOMO ke LUMO [30]. Simulasi ZINDO/s dengan batasan HOMO-LUMO masing-masing 3 menghasilkan 6 tingkatan orbital molekuler, yaitu HOMO-2/80, HOMO-1/81,

Potensi Senyawa Antosianin-3-Glikosida Sebagai Zat Warna

Potensi senyawa Antosianidin-3-Glikosida sebagai zat pewarna alami dilakukan secara eksperimen dan simulasi komputasi menggunakan metode semi empirik ZINDO/s (Tabel 4). Penelitian mengenai senyawa Antosianidin-3-Glikosida yang dilakukan melalui

HOMO/82, LUMO/83, LUMO+1/84 dan LUMO+2/85 (Gambar 2). Energi gap dengan nilai terendah terdapat pada tingkatan molekuler orbital 82→83 sebesar -5.750408 eV. Hal ini menjelaskan bahwa, pada tingkat molekuler tersebut terjadi eksitasi elektron yang lebih mudah (reaktif) karena memerlukan energi yang sedikit dibandingkan dengan tingkatan molekuler orbital lainnya ketika terjadi eksitasi elektron [31].

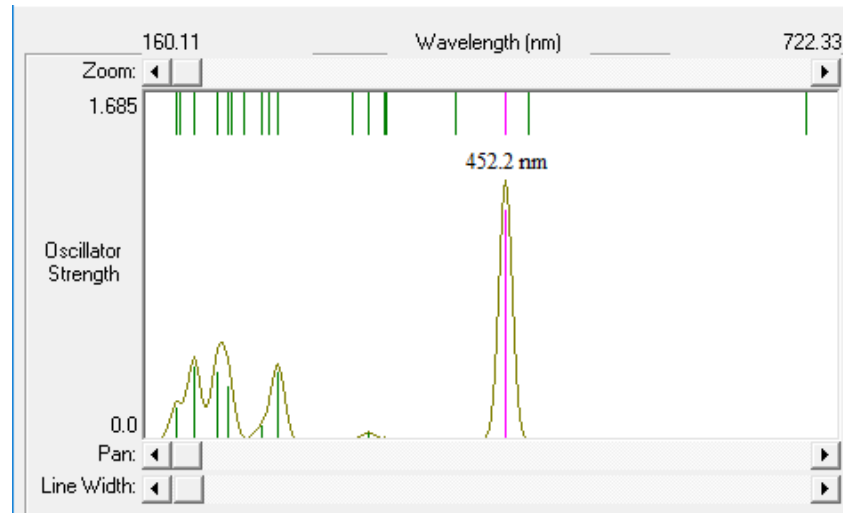
eksperimen secara spektrofotometri UV-Vis khususnya yang didapat melalui isolasi dari tumbuhan seperti ubi jalar ungu telah dilakukan dengan nilai λ_{maks} sebesar 520 nm. Sementara, itu simulasi pengukuran spektrum senyawa Antosianidin-3-Glikosida memperoleh nilai λ_{maks} sebesar 452.5 nm (Gambar 3).

Tabel 4. Perbandingan Spektra UV-Vis dengan ZINDO/s

Ekspirimen (nm)	Komputasi	Intesitas	Karakter Pigmen
520	452.5	1.1233	Biru-Ungu
290	267.5	0.3305	Tidak Berwana
220	218.1	0.3361	Tidak Berwana

Simulasi secara komputasi menggunakan metode ZINDO/s diharapkan mampu memprediksi secara baik peak/puncak yang diharapkan akan muncul ketika diukur secara eksperimen melalui

spektrofotometer UV-Vis. Akan tetapi, terdapat beberapa puncak dengan nilai intensitas yang kecil mungkin tidak akan terukur atau terbaca secara eksperimen [32].



Gambar 3. Spektrum Diskontinu ZINDO/s Senyawa Antosianidin-3-Glikosida

Hasil simulasi ZINDO/s menunjukkan terdapat 3 peak/puncak yang terukur secara eksperimen yang terukur pada daerah panjang gelombang UV dan Visibel. Daerah Visibel yang terukur terbaca pada panjang gelombang 400-800 nm akan menunjukkan karakter warna biru-merah [33]. Senyawa Antosianidin-3-Glikosida

KESIMPULAN

Pemodelan senyawa Antosianidin-3-Glikosida dioptimasi geometri molekulnya menggunakan metode semi empirik PM3 dengan hasil energi total sebesar -135721.5 (kcal/mol). Studi transisi elektronik senyawa Antosianidin-3-Glikosida menggunakan metode semi empirik ZINDO/s yang menunjukkan terdapat dapat 6 peak/puncak transisi elektronik dengan puncak tertinggi memiliki nilai intensitas paling besar yakni pada panjang gelombang visible, yaitu 425.5 nm (1.1233). Tipe transisi elektronik pada 6 peak/puncak tersebut menunjukkan 2 tipe transisi, yaitu $n \rightarrow \pi^*$ dan $\pi \rightarrow \pi^*$. Senyawa Antosianidin-3-Glikosida mempunyai potensi sebagai zat pewarna alami, dimana telah dilakukan melalui eksperimen terukur pada λ_{maks}

yang terukur pada rentang panjang gelombang baik secara eksperimen maupun komputasi menunjukkan karakter warna/pigmen biru-unngu. Hal ini membuktikan bahwa senyawa Antosianidin-3-Glikosida mempunyai potensi sebagai zat warna alami yang bisa didapat pada tumbuh-tumbuhan [34, 35]. sebesar 520 nm. Karakteristik pigmen (warna) berdasarkan serapan panjang gelombang secara eksperimen maupun simulasi ZINDO/s menunjukkan bahwa senyawa Antosianidin-3-Glikosida mempunyai warna dari biru-unngu.

DAFTAR PUSTAKA

- L. N. Lestario, E. Rahayuni and K. H. Timotius, Anthocyanin content and identification of anthocyanidin of blue marble (*elaecarpus angustifolius blume*) fruit peel, *AGRITECH*, 2011, **31**, 93-101.
- M. Suzery, S.Lestari dan B. Cahyono, Penentuan total antosianin dari kelopak bunga rosella (*hibiscus sabdariffa l.*) dengan metode maserasi dan sokshletasi, *J. Sains & Mat.*, 2010, **18**, 1-6.

- A. C. M. S. Gouvêa, M. C. P. de Araujo, D. F. SCHULZ, S. Pacheco, R. L. de O. Godoy and L. M. C. Cabral, Anthocyanins standards (cyanidin-3-O-glucoside and cyanidin-3-O-rutinoside) isolation from freeze-dried açai (*Euterpe oleraceae* Mart.) by HPLC, *Ciênc. Tecnol. Aliment.* 2012, **32**, 43-46.
- J. Alvionita, D. Darwis dan M. Efdi, Ekstraksi dan identifikasi senyawa antosianin dari jantung pisang raja (*musa x paradisiaca l.*) serta uji aktivitas antioksidannya, *J. Ris. Kim*, 2016, **9**, 21-28.
- C. Qin, Y. Li, W. Niu, Y. Ding, R. Zhang and X. Shang, Analysis and characterisation of anthocyanins in mulberry fruit, *Czech J. Food Sci.*, 2010, **28**, 117-126.
- M. P. Junqueira-Gonçalves, L. Yáñez, C. Morales, M. Navarro, R. A. Contreras and G. E. Zúñiga, Isolation and characterization of phenolic compounds and anthocyanins from murta (*ugni molinae turcz.*) fruits. Assessment of antioxidant and antibacterial activity, *Molecules*, 2015, **20**, 5698-5713.
- V. Truong, N. Deighton, R. T. Thompson, R. F. Mcfeeters, L. O. Dean, K. V. Pecota and G. C. Yencho, Characterization of anthocyanins and anthocyanidins in purple-fleshed sweetpotatoes by HPLC-DAD/ESI-MS/MS, *J. Agric. Food chem.*, 2010, **58**, 404-410.
- A. Delazar, L. Khodaie, J. Afshar, L. Nahar and S. D. Sarker, Isolation and free-radical-scavenging properties of cyaniding 3-O-glycosides from the fruits of *Ribes biebersteinii* Berl., *Acta Pharm.*, 2010, **60**, 1-11.
- D. Syukri, D. Darwis and A. Santoni, Major anthocyanin pigments in the *ficus padana* fruits: HPLC-DAD-ESI-MS identification and antioxidant activity, *Indo. J. Chem.*, 2014, **14**, 297-303.
- J. Lee, K. W. Barnes, T. Eisele, M. M. Giusti, J. Haché, H. Hofsommer, S. Koswig, D. A. Krueger, S. Kupina, S. K. Martin, B. K. Martinsen, T. C. Miller, F. Paquette, A. Ryabkova, G. Skrede, U. Trenn and J. D. Wightman, Determination of total monomeric anthocyanin pigment content of fruit juices, beverages, natural colorants, and wines by the pH differential method: collaborative study, *Journal of AOAC International*, 2015, **88**, 1269-1278.
- B. Mozetič, P. Trebše and J. Hribar, Determination and quantitation of anthocyanins and hydroxycinnamic acids in different cultivars of sweet cherries (*prunus avium l.*) from nova gorica region (slovenia), *Food technol. Biotechnol.*, 2002, **40**, 2017-212.
- S. Kumar, *Organic chemistry: Spectroscopy of organic compounds*, Dept. of Chemistry Guru Nanak Dev University, Amristar, 2006.
- Z. Z. Zam, D. Juniyaniti and K. A. Rakhman, Effectivity of ethanolic extracts from jambulang fruit (*syzygium cumini. l*) as ultraviolet anti-radiation agent, *Inter. J. Adv. Res.*, 2018, **6**, 949-954.
- F. L. da Silva, M. T. Escribano-Bailón, J. J. P. Alonso, J. C. Rivas-Gonzalo and C. Santos-Buelga, Anthocyanin pigments in strawberry, *LWT*, 2007, **40**, 374-382.
- Z. Marković, N. Manojlović and S. Zlatanović, Electronic absorption spectra of substituted anthraquinones and their simulation using ZINDO/S method, *Int. J. Serb.Soc.Comput. Mechan.* 2008, **2**, 73-79.
- O.A. Odunola and B. Semire, Semi-empirical (PM3) study of

- conformational analysis and electronic properties of functionalized, *Asian Journal of Chemistry*, 2008, **20**, 4343-4352.
- M. Noor, kasmui dan S.B.W.kusuma, Analisis hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas antimalaria senyawa turunan quinoxalin, *JURNAL MIPA*, 2016, **39**, 51-56.
- S. Gonta, M. Utinans, G. Kirilov, S. Belyakov, I. Ivanova, M. Fleisher, V. Savenkov and E. Kirilova, Fluorescent substituted amidines of benzanthrone: Synthesis, spectroscopy and quantum chemical calculations, *J. Spectrochim Acta Part A : Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2013, **101**, 325-334.
- E. Lewars, *Computational chemistry: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*, Kluwer Academic Publishers, USA, 2004.
- R. Hadanu, A QSAR analysis of flavone derivatives of antimalarial compounds based on PM3 semi-empirical method, *Asian Journal of Chemistry*, 2018, **30**, 148-156.
- K. A. Rakhman, A. M. Jayali, M. I. Abdjan, A. U. Ahmad and C. A. R. Putra, 1.10-Phenanthroline as anti-radiation uv agent: spectrophotometry analysis and modeling, *Global Journal of Science Frontier Research: B Chemistry*, 2018, **18**, 25-29.
- A. A. Hadi, Quantum-chemical study for some coumarin compounds by using semi-empirical methods, *J. ChemTech Research*, 2016, **9**, 139-148.
- A. Mahmudatussa'adah, D. Fardiaz, N. Andarwulan dan F. Kusnandar, Color characteristics and antioxidant activity of anthocyanin extract from purple sweet potato, *J. Teknol. dan Industri Pangan*, 2014, **25**, 176-184.
- M. P. Junqueira-Gonçalves, L. Yáñez, C. Morales, M. Navarro, R. A. Contreras and G. E. Zúñiga, Isolation and characterization of phenolic compounds and anthocyanins from murta (*ugni molinae* turcz.) fruits. assessment of antioxidant and antibacterial activity, *Molecules*, 2015, **20**, 5698-5713.
- F. J. Olivas-Aguirre, J. Rodrigo-García, N. del R. Martínez-Ruiz, A. I. Cárdenas-Robles, S. O. Mendoza-Díaz, Emilio Alvarez-Parrilla, G. A. González-Aguilar, L. A. de la Rosa, A. Ramos-Jiménez and A. Wall-Medrano, Cyanidin-3-o-glucoside: Physical-chemistry, Foodomics and health effects, *Molecules*, 2016, **21**, 1-30.
- K. A. Rakhman, Khadijah, M. I. Abdjan, N. Kumendong and S. D. Puspitasari, Modeling of Anthocyanin Derivatives as Anti-UV Agents, *JOTCSA*, 2019, **5**, 1287-1294.
- A. P. Asmara, Mudasir dan D. Siswanta, Analisis hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas senyawa turunan triazolopiperazin amida menggunakan metode semiempirik AM1, *Journal of islamic science and technology*, 2015, **1**, 125-138.
- R. Armunanto dan S. Sudiono, Relation of electronic structures with their antimalarial activities on artemisinin derivatives, *Indonesian Journal of Chemistry*, 2004, **4**, 212-217.
- M. Nepras, N. Almonasy, M. Michl, M. Dvorák and V. Fidler, Electronic structure, spectra and photophysical properties of N-triazinylderivatives of 1-aminopyrene. Semi-empirical theoretical study, *J. Dyes and pigments*, 2012, **92**, 1331-1336.
- G. Rahman dan W. Sutapa, Analisis pembuatan semikonduktor dari kompleks logam, *Bimafika*, 2009, **1**, 07 – 12.
- P. Itte, M.K. Amshumali, M. Pasha, Molecular modeling, geometry

- optimization and characterization of bimetallic complexes derived from s-indacene, *Universal Journal of Chemistry*, 2017, **5**, 48-57.
- A. R. Saraha, K. H. Rakhman and N. Sugrah, Anti UV-activity and elektronik transition study of 1,3-diphenyl-2-propenone using semi-empirical method ZINDO/s, *Asian Journal of Chemistry*, 2018, **30**, 1057-1060.
- D. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Kriz and J. R. Vyvyan, *Introduction of spectroscopy*, 5th edn., Cengage Learning, USA, 2013.
- J. Lee, C. Rennaker and R. E. Wrolstad, Correlation of two anthocyanin quantification methods: HPLC and spectrophotometric methods, *Food chemistry*, 2008, **110**, 782–786.
- H. Kelebek, A. Canbas and S. Selli, HPLC-DAD-MS analysis of anthocyanins in rose wine made from cv. Öküzgözü grapes, and effect of maceration time on anthocyanin content, *Chromatographia*, 2007, **66**, 207-212.