

PERSETUJUAN SKRIPSI
KARAKTERISASI KRISTAL TUNGGAL 7-METIL-2H-KROMEN-2-ON
DENGAN FTIR, NMR, UV-VIS DAN *SINGLE CRYSTAL X-RAY*
***DIFFRACTION* (SC-XRD)**

Nama : Deani Dwi Rahma Doni
TM/NIM : 2021/21036140
Program Studi : Kimia
Departemen : Kimia
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Padang, November 2025

Mengetahui :
Kepala Departemen Kimia


Budhi Oktavia, S.Si., M.Si., Ph.D
NIP. 19721024 199803 1 001

Disetujui Oleh :
Dosen Pembimbing


Okta Suryani, S.Pd., M.Sc., Ph.D
NIP.19891018/202012 2014

PENGESAHAN LULUS UJIAN SKRIPSI

Nama : Deani Dwi Rahma Doni
TM/NIM : 2021/21036140
Program Studi : Kimia
Departemen : Kimia
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

KARAKTERISASI KRISTAL TUNGGAL 7-METIL-2H-KROMEN-2-ON DENGAN FTIR, NMR, UV-VIS DAN *SINGLE CRYSTAL X-RAY* *DIFFRACTION (SC-XRD)*

Dinyatakan Lulus Setelah Dipertahankan di Depan Tim Penguji Skripsi
Departemen Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Padang

Padang, November 2025

Tim Penguji

No	Jabatan	Nama	Tanda Tangan
1	Ketua	Okta Suryani, S.Pd., M.Sc., Ph.D	1. 
2	Anggota	Dra. Suryelita, M.Si	2. 
3	Anggota	Miftahul Khair, S.Si., M.Sc., Ph.D	3. 

SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan dibawah ini

Nama : Deani Dwi Rahma Doni
TM/NIM : 2021/21036140
Tempat/Tanggal Lahir : Duri/ 22 November 2002
Program Studi : Kimia
Departemen : Kimia
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Judul Skripsi : Karakterisasi kristal tunggal 7-metil-2H-kromen-2-on dengan FTIR, NMR, UV-VIS dan *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD)

Dengan ini menyatakan bahwa :

1. Karya tulis/skripsi ini adalah hasil karya saya dan belum pernah diajukan untuk memperoleh gelar akademik (sarjana) baik di UNP maupun perguruan tinggi lainnya.
2. Karya tulis ini murni gagasan, rumusan, dan penelitian saya sendiri tanpa bantuan pihak lain kecuali tim pembimbing.
3. Pada karya tulis/skripsi ini tidak terdapat karya atau pendapat yang telah ditulis atau dipublikasikan orang lain kecuali tertulis dengan jelas dicantumkan pada kepustakaan.
4. Karya tulis/skripsi ini sah apabila telah ditandatangani Asli oleh tim pembimbing dan tim penguji.

Pernyataan ini saya buat dengan sungguh-sungguh dan apabila dikemudian hari terdapat penyimpangan dan ketidakbenaran di dalam pernyataan ini, maka saya bersedia menerima **Sanksi Akademik** berupa pencabutan gelar akademik yang telah diperoleh karena karya tulis/skripsi ini, serta sanksi lainnya sesuai dengan norma yang berlaku di perguruan tinggi.

Padang, November 2025
Yang Menyatakan



Deani Dwi Rahma Doni
NIM. 21036140

KARAKTERISASI KRISTAL TUNGGAL 7-METIL-2H-KROMEN-2-ON DENGAN FTIR, NMR, UV-VIS DAN *SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION* (SC-XRD)

SKRIPSI



Oleh:

**DEANI DWI RAHMA DONI
NIM/TM 21036140/21**

**PROGRAM STUDI KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI PADANG
2025**

KARAKTERISASI KRISTAL TUNGGAL 7-METIL-2H-KROMEN-2-ON DENGAN FTIR, NMR, UV-VIS DAN *SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION* (SC-XRD)

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains



Oleh:

**DEANI DWI RAHMA DONI
NIM/TM 21036140/21**

**PROGRAM STUDI KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI PADANG
2025**

KATA PENGANTAR

Penulis menyampaikan rasa syukur atas karunia dari Allah S.W.T yang telah memberikan kemampuan untuk menyelesaikan skripsi yang berjudul “Karakterisasi Kristal Tunggal 7-metil-2H-kromen-2on dengan FTIR, NMR, UV-Vis, dan *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD)”. Penyusunan skripsi ini merupakan bagian dari persyaratan untuk memperoleh gelar sarjana sains.

Penulisan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan, petunjuk, arahan, dan masukan yang berarti dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih yang tulus kepada:

1. Ibu Okta Suryani, S.Pd., M.Sc., Ph.D., selaku Dosen Pembimbing Akademik sekaligus Pembimbing Tugas Akhir, yang dengan kesabaran dan ketulusan telah membimbing penulis hingga penelitian ini selesai. Penulis menyampaikan terima kasih yang sebesar-besarnya atas waktu, perhatian, serta bimbingan Ibu yang penuh keikhlasan. Arahan dan dukungan Ibu menjadi inspirasi yang berharga.
2. Ibu Dra. Suryelita, M.Si., atas masukan, saran, dan ilmu berharga yang telah diberikan kepada penulis. Banyak pengetahuan dan wawasan baru yang penulis peroleh dari arahan serta penjelasan Ibu selama proses penyelesaian skripsi ini.
3. Bapak Miftahul Khair, S.Si., M.Sc., Ph.D., atas saran, arahan, dan ilmu yang sangat bermanfaat bagi penulis. Pandangan dan penjelasan Bapak telah menambah pemahaman serta memberikan nilai ilmiah yang berharga dalam penyelesaian skripsi ini.

4. Bapak Budhi Oktavia, S.Si., M.Si., Ph.D. selaku Koordinator Program Studi Kimia, sekaligus Kepala Departemen Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang.
5. Bapak dan Ibu Dosen Program Studi Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang yang telah membantu dan meluangkan waktunya untuk memberikan ilmu kepada penulis.
6. Kedua orang tua tercinta, atas kasih sayang, dukungan, dan keikhlasan yang tak pernah surut. Doa, motivasi, serta pelajaran hidup yang telah diberikan menjadi sumber kekuatan dan inspirasi bagi penulis untuk terus berjuang hingga berhasil menyelesaikan pendidikan pada jenjang sarjana ini.
7. Saudara kandung penulis Dio Donni Perdana, A.Md.QS selaku abang tersayang yang telah memberi dukungan, semangat, dan doa tulus.
8. Keluarga besar, yang telah menjadi bagian berharga dalam perjalanan hidup dan akademik penulis. Terima kasih atas doa, dukungan moril, serta kebersamaan yang menghadirkan semangat disetiap langkah. Sertiap bentuk perhatian yang diberikan telah menjadi sumber kekuatan yang berarti dalam menyelesaikan studi ini hingga akhir.
9. Ica, Essy, Putri, Radhia, Sherly dan Ami selaku teman seperjuangan selama masa kuliah yang telah berbagi semangat, kerja sama, dan moment tak terlupakan. Terima kasih telah menjadi bagian penting dalam lembaran cerita perjuangan ini.
10. Sindy, Eka, Vito dan Hanif selaku rekan satu tim penelitian, yang telah menjadi teman berjuang sekaligus partner kerja yang luar biasa. Terima kasih atas kebersamaan, dukungan, dan kerja sama yang tulus selama proses

penelitian ini. Setiap usaha, canda, dan semangat yang dibagikan menjadi bagian berharga dalam perjalanan penulis menyelesaikan skripsi ini.

11. Ayu, Ica dan Salwa selaku teman seperantauan dimasa perkuliahan ini yang senantiasa hadir dalam suka dan duka. Terimakasih atas tawa, pelukan, dan percakapan yang membuat perjalan ini terasa lebih bermakna dan ringan untuk dijalani.
12. Ana, Caca dan Indah selaku sahabat sedari SMP sampai saat ini, yang telah tumbuh bersama dalam suka, duka dan segala fase hidup. Terimakasih telah menjadi tempat pulang yang penuh cerita.
13. Teman-teman Departemen Kimia angkatan 2021 yang telah banyak membantu, memberikan dukungan, serta menemani penulis dalam menghadapi berbagai kendala selama proses penelitian dan penulisan skripsi ini.
14. Semua pihak yang telah memberikan kontribusi dan dukungan kepada penulis dalam penyelesaian skripsi ini.

Dalam penyusunan skripsi ini, penulis merujuk pada Panduan Penulisan Skripsi Non Kependidikan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang Tahun 2019. Penulis mohon maaf atas segala keterbatasan dan dengan kerendahan hati penulis mengharapkan masukan, kritikan dan saran dari semua pihak. Penulis mengucapkan terima kasih atas kontribusi yang diberikan.

Padang, Oktober 2025

Penulis

**KARAKTERISASI KRISTAL TUNGGAL 7-METIL-2H-KROMEN-2-ON
DENGAN FTIR, NMR, UV-VIS DAN *SINGLE CRYSTAL X-RAY*
DIFFRACTION (SC-XRD)**

Deani Dwi Rahma Doni

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan struktur kristal tunggal senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on serta menganalisis data spektroskopinya sebagai dasar konfirmasi struktur. Kristal tunggal diperoleh melalui proses rekristalisasi bertahap menggunakan etanol hangat hingga terbentuk kristal berbentuk jarum yang memenuhi syarat untuk analisis *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD). Karakterisasi pendukung dilakukan menggunakan FTIR, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR, dan UV-Vis. Spektrum FTIR menunjukkan pita serapan khas pada $1701,8\text{ cm}^{-1}$ yang menandakan adanya gugus karbonil ($\text{C}=\text{O}$) lakton, serta pada $1605,2\text{ cm}^{-1}$ untuk ikatan rangkap $\text{C}=\text{C}$ aromatik. Data ^1H -NMR memperlihatkan pola proton aromatik yang sesuai dengan kerangka kumarin tersubstitusi metil, sedangkan ^{13}C -NMR mengonfirmasi keberadaan karbonil dan karbon aromatik pada posisi yang sesuai. Spektrum UV-Vis menunjukkan dua puncak utama pada 248 nm dan 331 nm. Pergeseran serapan dari 248 nm ke 331 nm menandakan adanya sistem ikatan rangkap terkonjugasi yang lebih luas, di mana elektron π saling berinteraksi secara delokalisasi. Hasil SC-XRD menunjukkan bahwa 7-metil-2H-kromen-2-on membentuk kristal dengan susunan tiga dimensi yang simetris, termasuk dalam sistem kristal ortorombik dengan kelompok ruang Pbca (No. 61). Sistem ini menggambarkan bentuk kisi yang tersusun rapi dengan tiga sumbu berbeda panjang tetapi saling tegak lurus satu sama lain. Struktur molekulnya tersusun hampir datar (sebidang) dan distabilkan oleh interaksi lemah intramolekul $\text{C}-\text{H}\cdots\text{O}$ ($2,619\text{ \AA}$) yang membantu menjaga bentuk serta mendukung delokalisasi elektron π . Kombinasi hasil dari keempat teknik karakterisasi menunjukkan kesesuaian antara data spektroskopi dan hasil SC-XRD. Penelitian ini merupakan laporan pertama yang menyajikan data kristalografi 7-metil-2H-kromen-2-on, sekaligus melengkapi informasi spektroskopi yang telah tersedia sebelumnya.

Kata kunci : 7-metil-2H-kromen-2-on, kumarin, FTIR, NMR, UV-Vis, *Single Crystal X-Ray Diffraction* SC-XRD, struktur kristal.

CHARACTERIZATION OF SINGLE CRYSTAL 7-METHYL-2H-CHROMEN-2-ONE USING FTIR, NMR, UV-VIS AND SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION (SC-XRD)

Deani Dwi Rahma Doni

ABSTRACT

This study aims to determine the single-crystal structure of 7-methyl-2H-chromen-2-one and to analyze its spectroscopic data as a basis for structural confirmation. The single crystal was obtained through a stepwise recrystallization process using warm ethanol, producing needle-shaped crystals suitable for *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD) analysis. Supporting characterizations were carried out using FTIR, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR, and UV-Vis spectroscopy. The FTIR spectrum showed characteristic absorption bands at 1701.8 cm^{-1} , corresponding to the lactone carbonyl (C=O), and at 1605.2 cm^{-1} for the aromatic C=C bond. The ^1H -NMR spectrum displayed aromatic proton signals consistent with a methyl-substituted coumarin framework, while the ^{13}C -NMR spectrum confirmed the presence of carbonyl and aromatic carbon atoms at the expected positions. The UV-Vis spectrum exhibited two main absorption peaks at 248 nm and 331 nm. The shift from 248 nm to 331 nm indicates an extended conjugated π -system, suggesting delocalized electron interactions within the molecule. SC-XRD analysis revealed that 7-methyl-2H-chromen-2-one crystallizes in an orthorhombic system with a Pbc_a (No. 61) space group. This system represents a three-dimensional lattice with three mutually perpendicular axes of unequal lengths. The molecular structure is nearly flat (coplanar) and stabilized by weak intramolecular C–H $\cdots$ O interactions (2.619 Å), which help maintain the geometry and support π -electron delocalization. The combined results from all four characterization techniques show strong consistency between the spectroscopic data and the SC-XRD findings. This study presents the first crystallographic report of 7-methyl-2H-chromen-2-one, complementing the previously available spectroscopic information.

Keyword: 7-metil-2H-kromen-2-on, coumarin, FTIR, NMR, UV-Vis, Single Crystal X-Ray Diffraction; SC-XRD, crystal structure.

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	i
ABSTRAK	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
BAB I PENDAHULUAN	11
A. Latar Belakang	11
B. Identifikasi Masalah	14
C. Pembatasan Masalah	14
D. Rumusan Masalah	15
E. Tujuan Penelitian.....	15
F. Manfaat Penelitian	15
BAB II TINJUAN PUSTAKA	16
A. Kumarin	16
B. Spektroskopi <i>Fourier Transform Infrared Spectroscopy</i> (FTIR).....	19
C. Spektroskopi <i>Nuclear Magnetic Resonance</i> (NMR).....	21
D. Spektroskopi <i>UltraViolet-Visible</i> (UV-Vis).....	24
E. <i>Single Crystal X-Ray Diffraction</i> (SC-XRD).....	25
BAB III METODE PENELITIAN.....	30
A. Tempat dan Waktu Penelitian.....	30
B. Objek Penelitian	30
C. Alat dan Bahan.....	30
D. Prosedur Kerja.....	30
F. Karakterisasi.....	31
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	34
A. Pembuatan Kristal Tunggal 7-metil-2H-kromen-2-on`	34
B. Spektroskopi <i>Fourier Transform InfraRed</i> (FTIR).....	35

C. Spektroskopi <i>Nuclear Magnetic Resonance</i> (NMR).....	37
D. Spektroskopi <i>Ultra Violet-Visible</i> (UV-Vis).....	43
E. <i>Single Crystal Diffraction</i> (SC-XRD).....	43
BAB V PENUTUP.....	52
A. Kesimpulan	52
B. Saran.....	53
DAFTAR PUSTAKA	54
LAMPIRAN	57

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1 kumarin sederhana.....	16
Gambar 2. Modifikasi struktur kumarin.....	17
Gambar 3. 7-metil-2H-kromen-2-on.....	18
Gambar 4. kristal Tunggal 7-metil-2H-kromen-2-on.....	35
Gambar 5. Spektrum FTIR.....	36
Gambar 6. Spektrum ^1H -NMR kristal 7-metil-2H-kromen-2-on.....	38
Gambar 7. spektrum ^{13}C -NMR kristal 7-metil-2H-kromen-2-on	41
Gambar 8. hasil UV-Vis 7-metil-2H-kromen-2-on	43
Gambar 9. Struktur 3D 7-metil-2H-kromen-2-on.....	45
Gambar 10. <i>Packing</i> diagram 7-metil-2H-kromen-2-on.....	48
Gambar 11. kristal (<i>packing</i>) 7-metil-2H-kromen-2-on sumbu a	49
Gambar 12. kristal (<i>packing</i>) 7-metil-2H-kromen-2-on sumbu b.....	49
Gambar 13. kemasan (<i>packing</i>) 7-metil-2H-kromen-2-on sumbu c	50
Gambar 14. Interaksi non-kovalen pada kristal 7-metil-2H-kromen-2-on.	51

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Panjang gelombang serapan modifikasi kumarin.....	17
Tabel 2. Nilai pita absorpsi FTIR.....	21
Tabel 3. Pergeseran ^1H NMR.....	22
Tabel 4. Nilai pergeseran ^{13}C NMR.....	23
Tabel 5. Daerah serapan senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on	36
Tabel 6. Interpretasi data spektrum ^1H -NMR kristal 7-metil-2H-kromen-2-on ...	39
Tabel 7. spektrum ^{13}C -NMR kristal 7-metil-2H-kromen-2-on	41
Tabel 8. Parameter geometri terpilih panjang ikatan dan sudut ikatan	45

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Skema Kerja	57
Lampiran 2. Dokumentasi Penelitian	58

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Kumarin adalah senyawa cincin aromatik yang mengandung gugus lakton dan banyak ditemukan di berbagai tumbuhan. Senyawa ini dikenal memiliki banyak manfaat biologis, seperti antimikroba, antioksidan, antikoagulan, antiinflamasi, antivirus, dan bahkan berpotensi sebagai antikanker (Coruh & Ozdogan, 2014). Selain aktivitas biologisnya, kumarin juga menarik perhatian karena kemampuannya memancarkan cahaya (*fluoresensi*) ketika terkena sinar *ultraviolet*. Sifat ini muncul karena adanya ikatan rangkap yang saling berhubungan di dalam strukturnya, sehingga elektron di dalamnya bisa berpindah dan kembali sambil memancarkan cahaya. Hal ini membuat kumarin sering digunakan sebagai bahan dasar sensor *fluoresen* untuk mendeteksi zat tertentu, karena perubahan lingkungan kimia dapat mengubah warna atau intensitas cahaya yang dipancarkan.

Kemampuan kumarin memancarkan dan merespons cahaya juga menjadikannya penting dalam bidang optoelektronik, yaitu teknologi yang menggabungkan cahaya dan listrik, seperti pada lampu LED, laser, dan sel surya organik. Kumarin sederhana ini memiliki potensi besar sebagai bahan dasar untuk sensor dan perangkat optik modern. Meskipun strukturnya sederhana, kumarin dimodifikasi dengan menambahkan gugus lain pada posisi tertentu di cincin aromatiknya. Perubahan kecil ini bisa memengaruhi warna, intensitas cahaya, atau kestabilannya, sehingga sangat berguna

dalam pengembangan bahan sensor maupun material yang peka terhadap cahaya.

Turunan kumarin dapat diperoleh melalui substitusi pada posisi tertentu pada cincin aromatik maupun pada gugus lakton. Perubahan substituen, misalnya penambahan gugus metil pada posisi C-7, dapat memengaruhi sifat elektronik, kestabilan kristal, serta perilaku spektroskopi senyawa tersebut (Stefanou *et al.*, 2018). Salah satu turunan sederhana yang menarik adalah 7-metilkumarin dengan nama IUPAC 7-metil-2H-kromen-2-on, yang diketahui relatif stabil, memiliki sistem konjugasi π yang luas, serta berpotensi digunakan sebagai prekursor dalam sintesis senyawa turunan kumarin yang lebih kompleks. Beberapa penelitian juga menunjukkan bahwa kumarin ini memiliki aktivitas biologis, seperti efek melindungi hati (hepatoprotektif) dan kemampuan sebagai antioksidan (Lim *et al.*, 2003). Selain itu, kumarin ini juga memiliki sifat optik yang baik, yaitu mampu memancarkan cahaya dengan intensitas tinggi (*fluoresensi* kuat), memiliki pergeseran stokes yang besar yaitu selisih antara cahaya yang diserap dan yang dipancarkan cukup jauh serta dapat memancarkan cahaya pada wilayah spektrum tampak (Chethan Prathap & Lokanath, 2018).

Senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on sudah pernah dianalisis menggunakan berbagai metode. Analisis FTIR menunjukkan adanya pita serapan khas gugus karbonil lakton (C=O), ikatan rangkap aromatik (C=C), yang menjadi ciri penting senyawa kumarin dan turunannya (Alam *et al.*, 2018). Data spektroskopi ^1H -NMR dan ^{13}C -NMR juga telah digunakan

untuk mengonfirmasi keberadaan substituen metil, serta untuk mempelajari lingkungan kimia proton dan karbon dalam kerangka aromatiknya (Moghanian *et al.*, 2013). Selain itu, sifat optik 7-metil-2H-kromen-2-on ini telah dianalisis menggunakan UV-Vis spektroskopi, yang menampilkan transisi elektron ($\pi-\pi$) pada sistem aromatik terkonjugasi serta mendukung penjelasan mengenai *fluoresensinya* (Chethan Prathap & Lokanath, 2018).

Dalam penelitian senyawa organik, termasuk turunan kumarin, analisis kristal tunggal sangat penting karena perubahan kecil pada struktur molekul dapat memengaruhi bentuk molekul, susunan dalam kristal (packing), serta sifat optiknya (Chethan Prathap & Lokanath, 2018). Melalui teknik *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD), peneliti dapat memperoleh informasi lengkap mengenai parameter kisi, yaitu ukuran dan bentuk dasar dari sel satuan yang menyusun kristal. Parameter ini mencakup panjang sisi dan sudut antar sumbu dalam satu unit kristal yang menggambarkan bagaimana atom atau molekul tersusun di dalamnya. Selain itu, data SC-XRD juga mengungkap adanya interaksi antarmolekul, seperti ikatan hidrogen (tarikan lemah antara atom hidrogen dan atom elektronegatif seperti oksigen) serta interaksi tumpukan cincin aromatik ($\pi-\pi$ *stacking*), yaitu gaya tarik lemah antar cincin aromatik yang tersusun sejajar. Interaksi-interaksi ini tidak bersifat kovalen, tetapi sangat berperan dalam menjaga kestabilan dan bentuk kristal organik (Lauher *et al.*, 2008 and Stefanou *et al.*, 2018).

Teknik SC-XRD dikenal sebagai metode paling akurat atau *gold standard* untuk menentukan struktur molekul secara tiga dimensi karena

mampu memberikan gambaran posisi atom secara rinci. Melalui kajian kristalografi ini, peneliti dapat memahami hubungan antara susunan struktur padat (kristal) (Ghouili *et al.*, 2014). Namun demikian, meskipun FTIR, NMR, dan UV-Vis telah banyak digunakan untuk mempelajari 7-metil-2H-kromen-2-on hingga saat ini belum ada laporan mengenai data kristalografi SC-XRD senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on tersebut. Dengan demikian, penelitian ini menjadi menarik dan penting dilakukan untuk melengkapi data spektroskopi yang sudah ada sekaligus memberikan pemahaman yang lebih mendalam mengenai struktur tiga dimensi 7-metil-2H-kromen-2-on.

B. Identifikasi Masalah

Dari beberapa uraian yang dikemukakan pada latar belakang, maka dapat diidentifikasi masalah yaitu, belum pernah ada laporan mengenai data pengujian struktur kristal tunggal *single crystal X-Ray Diffraction (SC-XRD)* pada senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on.

C. Pembatasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini yaitu:

1. Penelitian ini hanya berfokus pada penentuan struktur kristal tunggal *Crystal X-Ray Diffraction (SC-XRD)* senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on.
2. Data Penunjang berupa data spektroskopi FTIR, NMR, dan UV-Vis sebagai teknik pendukung penentuan struktur.

D. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang penelitian ini, maka rumusan masalah dari penelitian ini adalah:

1. Bagaimana struktur kristal tunggal *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD) dari 7-metil-2H-kromen-2-on?
2. Bagaimana data spektroskopi FTIR, NMR, dan UV-Vis mendukung penentuan struktur senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on?

E. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah tersebut, dapat diketahui tujuan penelitian :

1. Untuk dapat mengetahui struktur kristal tunggal (*Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD) dari senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on.
2. Untuk dapat menganalisis data spektroskopi FTIR, NMR, dan UV-Vis sebagai teknik pendukung dalam mengonfirmasi struktur senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on.

F. Manfaat Penelitian

Melalui penelitian ini diharapkan memperoleh manfaat sebagai berikut:

1. Meningkatkan pemahaman tentang struktur kristal tunggal *Single Crystal X-Ray Diffraction* (SC-XRD) senyawa 7-metil-2H-kromen-2-on.
2. Dapat menjadi referensi bagi peneliti berikutnya.

BAB V

PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan bahwa:

1. Struktur kristal tunggal 7-metil-2H-kromen-2-on berhasil ditentukan menggunakan SC-XRD. Senyawa ini mengkristal dalam sistem ortorombik dengan ruang Pbca (No. 61), memiliki parameter kisi $a = 6,5900 \text{ \AA}$, $b = 13,1326 \text{ \AA}$, $c = 18,5818 \text{ \AA}$, dan volume sel $1608,14 \text{ \AA}^3$. Struktur molekul menunjukkan kerangka aromatik yang planar dengan adanya interaksi non-kovalen intramolekul $\text{C-H}\cdots\text{O}$ ($2,619 \text{ \AA}$) yang berperan dalam menstabilkan geometri molekul.
2. Data spektroskopi mendukung hasil kristalografi. Spektrum FTIR menampilkan pita khas regangan C=O pada $1701,8 \text{ cm}^{-1}$ dan C=C aromatik pada $1605,2 \text{ cm}^{-1}$. Spektrum $^1\text{H-NMR}$ menunjukkan pola proton aromatik yang sesuai dengan kerangka kumarin tersubstitusi metil, sementara $^{13}\text{C-NMR}$ memperlihatkan sinyal karbon aromatik dan karbonil pada sekitar δ 160 ppm. Spektrum UV-Vis menunjukkan dua serapan utama pada 248 nm dan 331 nm, dengan puncak 331 nm dikaitkan dengan transisi ($\pi \rightarrow \pi^*$) pada sistem terkonjugasi yang planar. Data ini konsisten dengan hasil SC-XRD yang menunjukkan adanya delokalisasi π yang diperkuat oleh interaksi intramolekul.

A. Saran

Penelitian ini dapat dikembangkan lebih lanjut dengan melakukan analisis kristalografi yang lebih mendalam untuk mengkaji pengaruh kondisi eksternal terhadap struktur dan kemasan kristal 7-metil-2H-kromen-2-on. Studi lanjutan dapat mencakup variasi pelarut, temperatur, atau tekanan kristalisasi untuk melihat perubahan pada parameter kisi, orientasi molekul, serta jenis interaksi non-kovalen yang terbentuk. Analisis ini diharapkan dapat memberikan pemahaman yang lebih mendalam mengenai faktor-faktor yang memengaruhi kestabilan struktur dan sifat fisik senyawa dalam fase padat.

DAFTAR PUSTAKA

- Achadiyah, T. B. (2013). Isolasi Dan Identifikasi Struktur Senyawa Trapezifolixanthone Dari Kulit Batang Tumbuhan Slati.
- Alam, M., Alam, M. J., Azaz, S., Parveen, M., Park, S., & Ahmad, S. (2018). DFT/TD-DFT calculations, spectroscopic characterizations (FTIR, NMR, UV–vis), molecular docking and enzyme inhibition study of 7-benzoyloxy coumarin. *Computational Biology and Chemistry*, 73, 65–78. <https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2018.01.007>
- Ali, A., Khalid, M., Rehman, M. F. ur, Haq, S., Ali, A., Tahir, M. N., Ashfaq, M., Rasool, F., & Braga, A. A. C. (2020). Efficient Synthesis, SC-XRD, and Theoretical Studies of O-Benzenesulfonylated Pyrimidines: Role of Noncovalent Interaction Influence in Their Supramolecular Network. *ACS Omega*, 5(25), 15115–15128. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00975>
- Amiliza Miarti1, L. L. (2022). Ketidapastian Pengukuran Analisa Kadar Biuret, Kadar Nitrogen, Dan Kadar Oil Pada Pupuk Urea di Laboratorium Kontrol Produksi PT Pupuk Sriwidjaja Palembang. *Cakrawala Ilmiah*, 3.
- Bai, Y., Du, J., & Weng, X. (2014). Synthesis, characterization, optical properties and theoretical calculations of 6-fluoro coumarin. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 126, 14–20. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2014.01.123>
- Basri, R., Khalid, M., Shafiq, Z., Tahir, M. S., Khan, M. U., Tahir, M. N., Naseer, M. M., & Braga, A. A. C. (2020). Exploration of chromone-based thiosemicarbazone derivatives: SC-XRD/DFT, spectral (IR, UV–Vis) characterization, and quantum chemical analysis. *ACS Omega*, 5(46), 30176–30188. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c04653>
- Chethan Prathap, K. N., & Lokanath, N. K. (2018). Synthesis, characterization, crystal structure and quantum chemical investigations of three novel coumarin-benzenesulfonylhydrazide derivatives. *Journal of Molecular Structure*, 1158, 26–38. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.01.007>
- Coruh, N., & Ozdogan, N. (2014). Fluorescent coumarin components of the bark of *Aesculus hippocastanum*. *Journal of Liquid Chromatography and Related Technologies*, 37(10), 1334–1350. <https://doi.org/10.1080/10826076.2013.789803>
- Desiraju, G. R., & Steiner, T. (2001). *The weak hydrogen bond: in structural chemistry and biology* (Vol. 9). International Union of Crystal.

- Ghouili, A., Dusek, M., Petricek, V., Ayed, T. Ben, & Hassen, R. Ben. (2014). Synthesis, crystal structure and spectral characteristics of highly fluorescent chalcone-based coumarin in solution and in polymer matrix. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 75(2), 188–193. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2013.09.011>
- Giacovazzo, C. (Ed.). (2002). *Dasar-dasar Kristalografi* (Vol. 7). Oxford University Press, AS.
- Isnawati, A., & Mudahar, H. (2012). *Isolasi dan identifikasi senyawa kumarin dari tanaman Artemisia Annua(L)*. [https://doi.org/Media Litbag Kesehatan Volume XVII Nomor 3 Tahun 2008](https://doi.org/Media%20Litbag%20Kesehatan%20Volume%20XVII%20Nomor%203%20Tahun%202008)
- Imelda, I. (2020). Optimasi Struktur Konjugasi Pada Zat Warna Organik Tipe A: Struktur Konjugasi. *Journal of Research and Education Chemistry*, 2(2), 61–61.
- Johnston, R. C.; Cheong, P. H.-Y. *C–H...O Non-Classical Hydrogen Bonding in the Stereomechanics of Organic Transformations: Theory and Recognition*. *Org. Biomol. Chem.* 2013, 11, 5057–5064. RSC Publishing
- Lauher, J. W., Fowler, F. W., & Goroff, N. S. (2008). Single-crystal-to-single-crystal topochemical polymerizations by design. *Accounts of Chemical Research*, 41(9), 1215–1229. <https://doi.org/10.1021/ar8001427>
- Lim, L. C., Kumar, F. J., & Amin, A. (2003). Trapped metastable phases in $\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ -(8-9)% PbTiO_3 single-crystal wafers. *Journal of Applied Physics*, 93(6), 3671–3673. <https://doi.org/10.1063/1.1555841>
- Lončar, M., Jakovljević, M., Šubarić, D., Pavlić, M., Služek, V. B., Cindrić, I., & Molnar, M. (2020). Coumarins in food and methods of their determination. In *Foods* (Vol. 9, Issue 5). MDPI Multidisciplinary Digital Publishing Institute. <https://doi.org/10.3390/foods9050645>
- Milanović, Ž. B., Dimić, D. S., Avdović, E. H., Milenković, D. A., Marković, J. D., Klisurić, O. R., Trifunović, S. R., & Marković, Z. S. (2021). Synthesis and comprehensive spectroscopic (X-ray, NMR, FTIR, UV–Vis), quantum chemical and molecular docking investigation of 3-acetyl-4-hydroxy-2-oxo-2H-chromen-7-yl acetate. *Journal of Molecular Structure*, 1225. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129256>
- Moghanian, H., Mobinikhaledi, A., & Monjezi, R. (2013). Synthesis, spectroscopy (vibrational, NMR and UV-vis) studies, HOMO-LUMO and NBO analysis of 8-formyl-7-hydroxy-4-methylcoumarin by ab initio calculations. *Journal of Molecular Structure*, 1052, 135–145. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2013.08.043>

- Nicolas Gunawidjaja, P. (2013a). *An Overview Of Nuclear Magnetic Resonance. In Integral* (Vol. 11, Issue 1).
- Pinalia, A. (2011). Penentuan metode rekristalisasi yang tepat untuk meningkatkan kemurnian kristal amonium perklorat (Ap). *Majalah Sains dan Teknologi Dirgantara*, 6(2).
- Ranjith, C., Vijayan, K. K., Praveen, V. K., & Kumar, N. S. S. (2010). Photophysical investigation of 3-substituted 4-alkyl and/or 7-acetoxy coumarin derivatives-A study of the effect of substituents on fluorescence. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 75(5), 1610–1616. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2010.02.027>
- Skoog, D. A. ., Holler, F. James., & Crouch, S. R. . (2008). *Principles of instrumental analysis*. Recording for the Blind & Dyslexic.
- Stefanou, V., Matiadis, D., Tsironis, D., Igglessi-Markopoulou, O., McKee, V., & Markopoulos, J. (2018). Synthesis and single crystal X-ray diffraction studies of coumarin-based Zn(II) and Mn(II) complexes, involving supramolecular interactions. *Polyhedron*, 141, 289–295. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.12.011>
- Steiner, T. (2002). Ikatan hidrogen dalam keadaan padat. *Angewandte Chemie International Edition* , 41 (1), 48-76.
- Steve Scheiner and Tapas Kar (2008). *Spectroscopic and Structural Signature of the CH-O Hydrogen Bond*. Department of Chemistry&Biochemistry.Utah State University, Logan, Utah 84322-0300.
- Strekalova, S., Kononov, A., Rizvanov, I., & Budnikova, Y. (2021). Acetonitrile and benzonitrile as versatile amino sources in copper-catalyzed mild electrochemical C-H amidation reactions. *RSC Advances*, 11(59), 37540–37543. <https://doi.org/10.1039/d1ra07650g>
- Stout, GH, & Jensen, LH (1989). *Penentuan struktur sinar-X: panduan praktis* . John Wiley & Sons.
- Vogel, A. I., & Furniss, B. S. (1989). *Vogel's textbook of practical organic chemistry*. Pearson.
- Wulan Sari, N., & Fajri, M. (2018). *Analisis Fitokimia dan Gugus Fungsi dari Ekstrak Etanol Pisang Goroho Merah(Musa Acuminata (L))* (Vol. 2, Issue 1).