


No	14	
Nama	AGUS DWIONO	
No Mhs	98/120747/PA/7429	
Pembimbing I	Dr. Jumina	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	PEMODELAN MOLEKUL DAN SINTESIS SENYAWA 2,4-DIMETOKSI HEKSIL SINAMAT SEBAGAI SENYAWA PENYERAP SINAR UV	
Abstrak	<p>Telah dilakukan pemodelan molekul berbagai senyawa alkil sinamat dan dilanjutkan sintesis senyawa 2,4-dimetoksi heksil sinamat sebagai senyawa tabir surya. Pemodelan meliputi prediksi tipe aktivitas dan prediksi aktivitas teoritik senyawa tabir surya. Tipe aktivitas diprediksi berdasarkan perhitungan transisi elektronik senyawa menggunakan metoda semiempirik ZINDO/s. Secara kuantitatif, aktivitas teoritik diprediksi berdasarkan kajian Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA) yang dipelajari berdasarkan analisis regresi linear antara aktivitas senyawa alkil sinamat ($\log C$) sebagai fungsi dari muatan bersih atom karbon aromatis penyusun senyawa (q). Pembuktian secara eksperimen dilakukan dengan sintesis senyawa 2,4-dimetoksi heksil sinamat melalui tahapan (a) sintesis heksil asetat dan (b) sintesis 2,4-dimetoksi heksil sinamat melalui reaksi kondensasi Claisen antara 2,4-dimetoksi benzaldehida dan heksil asetat. Produk diidentifikasi menggunakan IR, $^1\text{H-NMR}$, GC dan GC-MS. Pengujian aktivitas tabir surya dilakukan secara <i>in vitro</i> menggunakan spektrometer UV- Vis.</p> <p>Hasil pemodelan menunjukkan bahwa senyawa 2,4-dimetoksi heksil sinamat diduga memiliki aktivitas tabir surya tipe UV-A dan UV-B. Kajian HKSA menghasilkan bentuk persamaan:</p> $\log C = -3,31 + 48,74 \cdot qC_1 + 5,49 \cdot qC_2 - 9,21 \cdot qC_3 + 9,55 \cdot qC_4 - 17,02 \cdot qC_5 - 52,15 \cdot qC_6$ <p>dengan parameter-parameter statistik $n = 9$, $r = 0,987$, $r^2 = 0,974$, $SE = 0,216$ dan $F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}} = 1,366$ pada $\alpha = 10\%$.</p> <p>Prediksi aktivitas berbagai turunan senyawa 2,4-dimetoksi heksil sinamat relatif cukup baik sebagai tabir surya dengan harga C yang relatif kecil. Hasil sintesis senyawa 2,4-dimetoksi heksil sinamat berupa cairan kental berwarna kuning kecoklatan dengan rendemen 62,81% dan kemurnian (GC) 39,35%. Pengujian SPF <i>in vitro</i> menunjukkan aktivitas tipe UV-A dan UV-C, dan perlindungan maksimum diperoleh pada konsentrasi 39 $\mu\text{g/mL}$. Pada kasus ini, hasil pemodelan dan eksperimen relatif saling berkesesuaian.</p>	