


No	16	
Nama	IKE YULIASTUTI	
No Mhs	97/113907/PA/6940	
Pembimbing I	Dr. Jumina	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	PEMODELAN DAN SINTESIS SENYAWA TABIR SURYA 3,4-DIMETOKSI HEKSIL SINAMAT BERDASARKAN PERHITUNGAN KIMIA KOMPUTASI	
Abstrak	<p>Telah dilakukan sintesis senyawa 3,4-dimetoksi heksil sinamat melalui tahap pemodelan molekul dengan pendekatan kimia komputasi. Metoda tersebut meliputi prediksi tipe aktivitas senyawa secara kualitatif dengan menggunakan metoda semiempirik ZINDO/s dan prediksi aktivitas senyawa tabir surya secara kuantitatif berdasarkan analisis <i>Quantitative Structure Activity Relationship</i> (QSAR). Sintesis senyawa dilakukan melalui kondensasi Claisen terhadap 3,4-dimetoksi benzaldehida dan heksil asetat pada suhu refluks (70-90°C) selama 8 jam. Hasil yang diperoleh dimurnikan dengan destilasi pengurangan tekanan dan kromatografi kolom menggunakan eluen diklorometana-petroleum eter dengan perbandingan 1:1. Untuk karakterisasi produk digunakan spektrometer IR, ¹H NMR dan GC-MS. Selanjutnya dilakukan pengujian aktivitas tabir surya secara <i>in vitro</i> dan <i>in vivo</i> terhadap senyawa hasil sintesis.</p> <p>Hasil perhitungan menunjukkan senyawa tersebut tergolong senyawa tabir surya UV-B dengan memberikan serapan pada 308,6 dan 291,5 nm. Aktivitas terbaik senyawa hasil prediksi QSAR adalah 0,86 µg/mL. Produk sintesis yang diperoleh berupa senyawa dengan kemurnian 94,93% yang diduga sebagai 3,4-dimetoksi heksil sinamat. Analisis aktivitas senyawa secara <i>in vitro</i> dengan spektrofotometer UV menunjukkan bahwa senyawa hasil memiliki serapan maksimum pada λ_{maks} 323 nm dan konsentrasi serapan maksimum 9,55 µg/mL yang memberikan nilai <i>Sun Protection Factor</i> (SPF) 15. Analisis secara <i>in vivo</i> dengan hewan uji marmut (<i>Guinea pig</i>) menunjukkan bahwa pada konsentrasi 8 -10 µg/mL senyawa dapat melindungi kulit dari sinar UV dengan skor 0,87-0,97.</p>	