


No	19	
Nama	DIANA SUSANTI	
No Mhs	98/120570/PA/7365	
Pembimbing I	Dr. Jumina	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	PEMODELAN MOLEKUL DAN SINTESIS SENYAWA PENYERAP SINAR UV 2,4-DIMETOKSI AMIL SINAMAT BERDASARKAN PENDEKATAN KIMIA KOMPUTASI	
Abstrak	<p>Telah dilakukan pemodelan molekul dan sintesis senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat sebagai senyawa tabir surya. Sintesis dilakukan melalui tahap pemodelan dengan pendekatan kimia komputasi yakni prediksi tipe aktivitas senyawa secara kualitatif dengan menggunakan metoda semiempirik <i>ZINDO/s</i> dan prediksi tipe aktivitas tabir surya secara kuantitatif berdasarkan analisis <i>Quantitative Structure Activity Relationship</i> (QSAR). Reaksi yang dilakukan untuk sintesis meliputi esterifikasi amil alkohol dan dilanjutkan dengan pengkondensasian menggunakan 3,4-dimetoksi benzaldehida dan amil asetat hasil esteri fikasi.</p> <p>Hasil perhitungan menunjukkan senyawa 3,4-dimetoksi amil sinamat tergolong senyawa tabir surya UV-C dengan $\lambda_{maks} = 273,55$ nm. Senyawa turunan amil sinamat yang dapat diusulkan untuk disintesis yaitu 3,4-dimetoksi amil sinamat dengan gugus alkil berupa <i>n</i>-amil dengan konsentrasi teoritik sebesar 0,8662 $\mu\text{g/mL}$. Sintesis dilakukan dengan cara (1) esterifikasi terhadap amil alkohol menggunakan asam asetat glasial dengan penambahan H_2SO_4 pada suhu refluks (120 °C) selama 6 jam menghasilkan amil asetat dengan rendemen 62,69 % dan dilanjutkan dengan (2) sintesis ester sinamat pada suhu 80 °C selama 6 jam menghasilkan senyawa yang diduga sebagai 3,4-dimetoksi amil sinamat dengan rendemen 51,25 %. Karakterisasi produk dilakukan dengan menggunakan GC, dan spektrometer IR, ^1H NMR, serta GC-MS. Berdasarkan uji analisis <i>in vitro</i>, produk tersebut memiliki serapan maksimum pada $\lambda_{maks} = 288$ nm dan mampu memberikan proteksi maksimum pada konsentrasi 25 $\mu\text{g/mL}$ dengan harga SPF sebesar 12,078.</p>	