

ANALISIS *IN SILICO* AKTIVITAS TABIR SURYA SENYAWA TURUNAN OKSIBENZON MENGGUNAKAN PERHITUNGAN ORBITAL MOLEKUL SEMIEMPIRIK ZINDO/s

Rahmi¹ dan Iqmal Tahir²

¹Jurusan Kimia FMIPA Universitas Syiah Kuala,
Darussalam, Banda Aceh

²Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria, Jurusan Kimia,
Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta (Email : igmal@ugm.ac.id)

INTISARI

Telah dilakukan analisis *in silico* senyawa tabir surya turunan oksibenzon (2-hidroksi-4-metoksi benzofenon) berdasarkan data transisi elektronik dan nilai koefisien partisi oktanol-air ($\log P$). Prosedur perhitungan dilakukan berupa optimasi struktur geometri dengan metoda semiempirik AM1 dan dilanjutkan perhitungan transisi elektronik dengan metoda semiempirik ZINDO/s. Hasil penelitian menunjukkan bahwa bentuk rantai alkil pada senyawa ternyata relatif tidak berpengaruh pada tipe aktivitas senyawa tabir surya, tapi berpengaruh terhadap hidrofobisitas. Efek substitusi pada gugus fenil akan mengubah aktivitas maupun hidrofobisitas. Dari beberapa senyawa desain, diperoleh satu senyawa yang mempunyai aktivitas daerah UV-B dan mempunyai hidrofobisitas mendekati senyawa standar 4-metoksi oktil sinamat yaitu senyawa 2,2'-dihidroksi-4-heksoksi benzofenon.

Kata kunci : tabir surya, oksibenzon, transisi elektronik, lipofilitas.

ABSTRACT

In silico analysis of sunscreen compound; oxybenzone (2-hydroxy-4-methoxy benzophenone) has been carried out. The modelling was based on electronic transition data and partition coefficient of octanol-water ($\log P$). The calculation procedure was done as geometry structure optimization semiempirical method, AM1 and followed with electronic transition using semiempirical method, ZINDO/s. The result show that alkyl chain of the compound has no effect on the activity type of sunscreen compound, but it gave effect on the hidrofobisity. Substitution effect of

phenyl group will change the activity and hidrofobisity of the compound of medelled compound, only 2,2-dihydroxy-4-hexoxy benzophenone has activities on UV-B region and it has hidrofobisity similar to standard compound ; 4-methoxy octyl cinamate.

Keywords : *sunscreen, oxybenzone, electronic transition, lipophility.*

PENDAHULUAN

Senyawa tabir surya merupakan suatu senyawa yang dapat digunakan untuk menyerap radiasi sinar matahari terutama pada daerah emisi panjang gelombang ultraviolet (UV). Senyawa ini akan dapat mencegah terjadinya gangguan kulit akibat pajanan sinar matahari. Sinar radiasi UV berdasarkan efek klinik digolongkan tiga bagian berdasarkan klasifikasi oleh Kimbrough (1997) yakni senyawa tabir surya tipe A (menyerap sinar UV pada panjang gelombang 315-400 nm), tipe B (menyerap sinar UV pada panjang gelombang 290-315 nm), dan tipe C (menyerap sinar UV pada panjang gelombang 200-290 nm) (Kimbrough, 1997). Radiasi UV-C memiliki panjang gelombang yang pendek dan hampir secara utuh terfiltrasi oleh lapisan ozon dari atmosfer. Radiasi UV-B adalah radiasi yang menyebabkan pembakaran dan *tanning* yang biasanya dihubungkan dengan kanker kulit. Radiasi UV-A dihubungkan dengan hal yang relatif tidak membahayakan karena UV-A hanya dapat menyebabkan warna kulit tua tanpa menyebabkan kulit terbakar. Walaupun demikian baru-baru ini, ditemukan bahwa UV-A mampu melakukan penetrasi ke kulit lebih dalam dan dapat menyebabkan kerusakan kulit dalam jangka panjang. UV-A menyebabkan meningkatnya UV-B radiasi yang memiliki potensi untuk menyebabkan kanker dan menurunkan sistem kekebalan tubuh (Saliba, 2001).

Senyawa yang beraktivitas sebagai tabir surya antara lain turunan asam-amino benzoat (PABA), asam salisilat, antranilat, sinamat, dan benzofenon (Finner, M.J., 1987). Benzofenon dan turunannya mempunyai fotostabilitas yang sangat baik dan bisa berfungsi sebagai penyaring sinar radiasi UV (Raspanti, 1997). Salah satu senyawa tabir surya turunan benzofenon yang banyak digunakan adalah oksibenzon (2-hidroksi-4-metoksi benzofenon). Senyawa tersebut sudah dipatenkan di banyak negara dan banyak digunakan sebagai komponen kosmetik khusus dengan khasiat tambahan sebagai tabir surya atau *UV-protection*. Apabila senyawa 2-hidroksi-4-metoksi benzofenon ditinjau dari segi struktur kimiawi maka terlihat ada tiga bagian yang dimungkinkan berperanan yakni bagian rantai alkil dan

dua gugus fenil (gambar 1). Pengembangan desain senyawa turunan baru dapat dilakukan dengan modifikasi rantai alkil yang lain seperti homolog-homolog alkil atau dengan penggunaan gugus-gugus fenil tersubstitusi lainnya. Hal ini perlu dilakukan dalam rangka penemuan senyawa tabir surya baru yang mungkin lebih efektif.

Desain senyawa tabir surya telah dilakukan dengan beberapa cara yakni dengan eksperimen langsung dan dengan memanfaatkan metode kimia komputasi. Desain senyawa tabir surya menggunakan kimia komputasi dilakukan dengan melihat panjang gelombang serapan dari suatu senyawa dan selanjutnya dari nilai panjang gelombang serapan tersebut dapat ditentukan tipe aktivitas senyawa tersebut. Desain senyawa tabir surya dengan kimia komputasi memiliki keunggulan yang lebih efisien relatif dibandingkan dengan eksperimen langsung. Biaya dan waktu yang dikeluarkan untuk proses desain suatu senyawa tabir surya dengan menggunakan kimia komputasi relatif lebih sedikit. Selain itu dengan kimia komputasi dapat diperoleh lebih banyak model senyawa baru dengan biaya murah dan mudah dilakukan.

Penerapan metoda kimia komputasi di dalam desain senyawa tabir surya baru tersebut dapat dicoba. Beberapa hal yang dapat dilakukan antara lain adalah kajian penentuan aktivitas tipe senyawa tabir surya turunan benzofenon berdasarkan penentuan spektra transisi elektronik teoritik dan kajian sifat hidrofobisitas senyawa tersebut berdasarkan kepada harga logaritmik koefisien partisi ($\log P$) (Tahir, I., 2000). Koefisien partisi (n -oktanol/air) ini dapat digunakan untuk memprediksi aktivitas senyawa tabir surya berdasarkan perbedaan tingkat kepolaran dari suatu struktur senyawa tabir surya tersebut. Bagian dari senyawa tabir surya yang dapat berinteraksi dengan reseptor adalah bagian alkil, yang mempengaruhi ketahanan senyawa tersebut untuk menempel lebih lama di kulit.

Pada penelitian ini desain senyawa tabir surya dilakukan dengan modifikasi rantai alkil dengan suatu homolog alkil dan substitusi gugus kromofor pada rantai fenil. Penggunaan metoda kimia komputasi yang dilakukan adalah perhitungan spektra elektronik berupa nilai-nilai transisi energi antar lintasan orbital yang dialami elektron pada suatu senyawa (Leach, A.R., 1996). Untuk tiap transisi yang terjadi pada nilai energi tertentu, ditunjukkan suatu nilai panjang gelombang yang terkait. Intensitas yang tertinggi pada spektra yang dihasilkan akan menunjukkan suatu panjang gelombang serapan maksimum teoritik untuk senyawa tersebut. Berdasarkan nilai panjang gelombang serapan maksimum tersebut maka tipe aktivitas senyawa tabir surya dapat diprediksi. Selanjutnya dapat ditentukan sifat

bioefektivitas senyawa tabir surya tersebut dengan menentukan nilai log P, yang nilainya dibandingkan dengan harga logaritmik koefisien partisi senyawa tabir surya standar yaitu senyawa *p*-metoksi oktil sinamat. Hasil penelitian ini diharapkan dapat merekomendasikan beberapa senyawa turunan oksibenzon guna dikembangkan sebagai senyawa tabir surya.

METODOLOGI

Materi Penelitian

Pada penelitian ini digunakan data berbagai model struktur senyawa turunan oksibenzon secara teoritik.

Peralatan

Untuk melakukan penelitian kimia komputasi digunakan perangkat keras berupa workstation PC Pentium IV-1, 5 GHz, 128 MB RAM, dan perangkat lunak Hyperchem versi 6.0 (Anonim, 1996).

Prosedur Penelitian

Pada kajian ini dilakukan pemodelan terhadap senyawa turunan oksibenzon dengan variasi alkil dan dengan variasi gugus pensubstitusi pada cincin fenil. Struktur senyawa dengan menggunakan perangkat lunak *HyperChem* dibuat terlebih dahulu secara dua dimensi dan kemudian dibentuk menjadi struktur tiga dimensi sehingga merupakan struktur yang mewakili senyawa yang dikehendaki. Selanjutnya dilakukan perhitungan berupa optimasi geometri untuk mendapatkan model molekul yang memiliki energi relatif paling minimum. Proses perhitungan dilakukan dengan menggunakan metoda semiempirik AM1 dan dilakukan berdasarkan metoda gradien sekawan sampai tingkat konvergensi yang ditetapkan sebesar 0,001 kkal/Å. Selanjutnya perhitungan spektra transisi energi elektronik dilakukan dengan metoda semiempirik ZINDO/s. Pada metoda perhitungan ini, kriteria yang dipenuhi untuk metode interaksi konfigurasi: eksitasi tunggal (*singly excited-CI*) dan selisih lintasan energi orbital HOMO-LUMO sebesar 2. Tingkat degenerasi maksimum ditentukan sampai batas 3. Pada saat perhitungan, dilakukan pengaktifan pencatat proses. Perhitungan (*file log*) sehingga *output* perhitungan dapat ditunjukkan secara rinci. Hasil *output* disarikan kembali dalam bentuk tabel berupa parameter panjang gelombang (nm) yang terkait dan intensitas energi. Setelah itu dilakukan perhitungan log P, yang nilainya dibandingkan dengan nilai log P dari senyawa tabir surya standar (*p*-metoksi-oktil sinamat).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dari hasil penelitian ini disajikan data perhitungan spektra transisi elektronik senyawa turunan oksibenzon dengan variasi gugus alkil yang digunakan, data hasil perhitungan spektra transisi elektronik senyawa turunan oksibenzon dengan variasi gugus pensubstitusi pada bagian rantai benzil, kemudian hasil analisis dibandingkan dengan senyawa standar

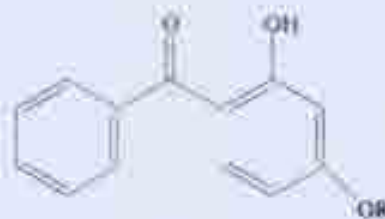
Pengaruh Rantai Alkil terhadap Aktivitas Senyawa

Ringkasan data keseluruhan hasil perhitungan disajikan pada Tabel 1.

Tabel 1. Spektra transisi senyawa tabir surya turunan oksibenzon pada panjang gelombang sinar UV (200 – 400) nm

No.	Rantai alkil	λ (nm)	Intensitas	Golongan
1.	CH ₃ -	277,76	0,305	UV-C
2	CH ₂ -CH ₂ -	277,58	0,316	UV-C
3	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	277,51	0,319	UV-C
4	CH ₂ -C(CH ₃)H-	278,17	0,332	UV-C
5	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	277,49	0,321	UV-C
6	CH ₂ -C(CH ₃)H-CH ₂ -	278,14	0,397	UV-C
7	CH ₂ -CH ₂ -C(CH ₃)H-	278,73	0,393	UV-C
8	(CH ₃) ₂ C-	279,09	0,379	UV-C
9	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	277,51	0,320	UV-C
10	CH ₂ -C(CH ₃)H-CH ₂ -CH ₂ -	277,50	0,321	UV-C
11	CH ₂ -CH ₂ -C(CH ₃)H-CH ₂ -	277,52	0,320	UV-C
12	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -C(CH ₃)H-	278,06	0,339	UV-C
13	CH ₂ -C(CH ₃)H-C(CH ₃)H-	278,24	0,334	UV-C
14	CH ₂ -CH ₂ -C(CH ₃)H-	278,56	0,397	UV-C
15	CH ₂ -C(CH ₃)(-CH ₃)-CH ₂ -	277,55	0,318	UV-C
16	CH ₂ -CH ₂ -C(CH ₃)(-CH ₃)-	279,24	0,360	UV-C
17	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	277,50	0,320	UV-C
18	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	277,43	0,323	UV-C
19	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	277,44	0,324	UV-C

Senyawa yang diuji adalah senyawa turunan oksibenzon (2-hidroksi-4-metil benzofenon) seperti pada gambar 1 dengan variasi gugus alkil pada rantai OH.



Gambar 1. Struktur senyawa oksibenzon (2-hidroksi-4-metoksi benzofenon)

Data yang ditunjukkan pada Tabel 1 hanya disajikan berupa data panjang gelombang serapan maksimum yang dihasilkan dari perhitungan yang berada pada daerah UV-nyata. Spektra yang dihasilkan sesungguhnya adalah spektra diskontinyu berupa pita-pita diskrit yang menunjukkan intensitas serapan sinar akibat terjadinya eksitasi elektron. Intensitas yang ditunjukkan harganya pada tabel tersebut dinyatakan dalam satuan intensitas secara relatif. Nilai $\log P$ dihitung dengan menjumlahkan nilai tetapan substituen yang terkait terhadap jenis dan jumlah dari atom, fragmen atau gugus penyusun molekul. Nilai tetapan substituen adalah logaritma sumbangan substituen pada logaritma koefisien partisi, yang dapat diperoleh dari kumpulan bank data.

Pada Tabel 1 terlihat panjang gelombang serapan maksimum teoritik ternyata tidak begitu terpengaruh oleh pengaruh penggantian bentuk gugus alkil yang mensubstitusi pada senyawa oksibenzon. Variasi gugus alkil mulai dari rantai lurus mulai homolog metil (C_1) sampai oktil (C_8) tidak mengakibatkan pergeseran panjang gelombang maksimum yang berarti. Demikian pula adanya bentuk percabangan seperti yang ditunjukkan pada rantai alkil seperti propil, butil, dan amil ternyata juga tidak berakibat pergeseran yang berarti. Hal ini dapat dipahami karena gugus-gugus alkil tersebut relatif tidak mengandung adanya gugus kromofor, yakni gugus-gugus berupa senyawa kimiawi yang mengakibatkan adanya interaksi dengan energi pada daerah sinar UV. Dengan demikian perubahan bentuk gugus juga relatif tidak berakibat adanya perubahan daerah panjang gelombang maksimum. Apabila diinginkan terjadinya pergeseran daerah panjang gelombang maksimum akibat substitusi, tentu saja desain senyawa tabir surya yang dilakukan adalah dengan menggunakan gugus yang mengandung kromofor.

Namun demikian jika dilihat dari nilai log P senyawa-senyawa tersebut (Tabel 2), terlihat adanya perubahan yang cukup berarti. Semakin panjang gugus alkil nilai log P yang dihasilkan juga semakin besar. Hal ini dapat dimaklumi karena semakin panjang gugus alkil maka senyawa akan bersifat semakin tidak polar sehingga log P akan semakin besar dan senyawa akan bersifat semakin hidrofob.

Tabel 2. Pengaruh gugus alkil terhadap nilai koefisien partisi oktanol-air (log P) Senyawa tabir surya turunan oksibenzon

No	Rantai alkil, R	Golongan	Log P
1	CH ₃ -	Metil	2,73
2	CH ₃ -CH ₂ -	Etil	3,07
3	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -	Propil	3,54
4	CH ₃ -C(-CH ₃)H-	Propil	3,49
5	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	Butil	3,94
6	CH ₃ -C(CH ₃)H-CH ₂ -	Butil	3,94
7	CH ₃ -CH ₂ -C(CH ₃)H-	Butil	3,96
8	(CH ₃) ₂ C-	Butil	3,56
9	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	Amil	4,33
10	CH ₃ -C(-CH ₃)H-CH ₂ -CH ₂ -	Amil	4,27
11	CH ₃ -CH ₂ -C(-CH ₃)H-CH ₂ -	Amil	4,34
12	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -C(-CH ₃)H-	Amil	4,35
13	CH ₃ -C(-CH ₃)H-C(-CH ₃)H-	Amil	4,36
14	CH ₃ -CH ₂ -C(-CH ₂ -CH ₃)H-	Amil	4,42
15	CH ₃ -C(-CH ₃)(-CH ₃)-CH ₂ -	Amil	4,45
16	CH ₃ -CH ₂ -C(-CH ₃)(-CH ₃)-	Amil	4,03
17	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	Heksil	4,73
18	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	Heptil	5,13
19	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	Oktil	5,52

Apabila nilai log P senyawa-senyawa tersebut dibandingkan dengan log P senyawa tabir surya standar *p*-metoksi oktil sinamat (log P = 4,72), dapat dilihat bahwa senyawa dengan gugus heksil mempunyai nilai log P yang berdekatan dengan log P senyawa standar, yaitu 4,73. Berdasarkan hal ini maka senyawa ini digunakan sebagai model selanjutnya untuk memperoleh senyawa turunan oksibenzon dengan pergeseran panjang gelombang yang cukup berarti dan mempunyai nilai log P yang mendekati log P senyawa standar.

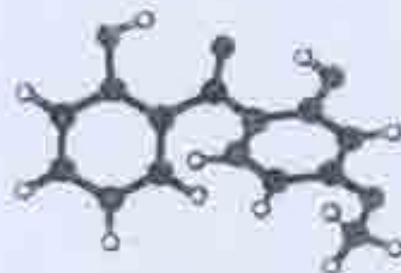
Pengaruh Substitusi Gugus pada Fenil terhadap Aktivitas Senyawa

Ringkasan data keseluruhan hasil perhitungan disajikan pada Tabel 3

Tabel 3. Pengaruh substitusi gugus pada benzil terhadap panjang gelombang maksimum senyawa oksibenzon (2-hidroksi-4-metoksi benzofenon)

No	Senyawa	λ maksimum teoritik (nm)	Intensitas	Log P
1.	2-hidroksi-4-metoksi benzofenon (oksibenzon)	277,76	0,305	2,73
2.	2-hidroksi-4,4'-metoksi benzofenon	277,44	0,470	2,48
3.	2-hidroksi-4-metoksi-4'-heksoksi benzofenon	277,28	0,516	4,48
4.	2,2'-dihidroksi-4 metoksi benzofenon	283,93	0,499	2,45
5.	2,2'-dihidroksi-4,4' dimetoksi benzofenon	283,41	0,672	2,19
6.	2,2'-dihidroksi-4 heksoksi benzofenon	283,78	0,515	4,45
7.	2,2'-dihidroksi-4 metoksi-4' heksoksi benzofenon	283,46	0,676	4,19
8.	2,2'-dihidroksi-4,4' diheksoksi benzofenon	283,52	0,677	6,19

Senyawa yang diuji adalah senyawa turunan oksibenzon seperti pada Gambar 1 dengan variasi pensubstitusi pada daerah cincin fenil. Contoh hasil pemodelan ini yakni 2,2'-dihidroksi-4-metoksi benzofenon disajikan pada Gambar 2.

**Gambar 2. Contoh model molekul 2,2'-dihidroksi-4-metoksi benzofenon hasil perhitungan**

Pada penelitian ini dicoba dilakukan perhitungan senyawa-senyawa benzofenon dengan berbagai variasi gugus pensubstitusi, yakni hidroksi, metoksi,

heksoksi, dan berbagai kombinasi untuk dua atau tiga gugus pensubsitusi pada beberapa posisi.

Hasil perhitungan seperti yang ditunjukkan pada Tabel 2 memperlihatkan bahwa pengaruh substitusi alkoksi tidak menyebabkan pergeseran panjang gelombang, tapi pengaruh hidroksi menyebabkan pergeseran daerah panjang gelombang serapan maksimum maupun nilai log P dari senyawa oksibenzon. Oksibenzon yang pada awalnya mempunyai panjang gelombang maksimum teoritik 277,76 nm, akibat substitusi gugus hidroksi mengalami pergeseran panjang gelombang serapan maksimum ke arah yang lebih besar yaitu 283,93 nm. Variasi substitusi gugus alkoksi pada senyawa benzofenon yang mempunyai 2 hidroksi tidak terlalu mempengaruhi nilai panjang gelombang serapan maksimumnya, yaitu nilainya berkisar 283 nm. Walaupun demikian variasi substitusi gugus alkoksi ini telah mempengaruhi nilai log P, dimana nilai log P yang mendekati nilai log P senyawa standar (4-metoksi oktil sinamat) adalah 2,2'-dihidroksi-4-heksoksi benzofenon yaitu sebesar 4,45.

Dalam hal penentuan panjang gelombang serapan maksimum senyawa secara eksperimental, spektra yang dihasilkan adalah spektra kontinyu dan pengaruh dari senyawa-senyawa lain yang terikat cukup besar. Menurut Walters *et al* (1997), harga λ_{maks} yang diperoleh secara eksperimen diperkirakan berkisar antara λ_{maks} hasil pemitungan sampai sekitar terjadi penambahan 10 nm. Hal ini dimungkinkan karena perbedaan tinjauan molekular dari sistem pengamatan. Penentuan secara pemodelan dilakukan untuk suatu molekul dalam keadaan reisolasi, sedangkan pengamatan secara eksperimen dilakukan untuk senyawa dalam suatu sistem kimia. Oleh karena itu faktor interaksi antar molekuler akan ikut menentukan harga panjang gelombang maksimum eksperimen. Sebagai contoh misalnya adalah senyawa tabir surya dari oksibenzon memiliki panjang gelombang serapan maksimum teoritik 277 nm, nilai kisaran panjang gelombang serapan maksimum secara eksperimen berada pada kisaran antara 277 nm sampai $(277 + 10)$ nm = 287 nm. Predikasi ini kemudian diterapkan pada senyawa tabir surya yang lain. Hasil yang diperoleh disajikan pada Tabel 4.

Tabel 4. Kisaran panjang gelombang maksimum dan tipe senyawa tabir surya dari turunan oksibenzon

No	Senyawa	λ_{max} (nm)	Kisaran λ_{max} prediksi (nm)	Tipe senyawa tabir surya
1.	2-hidroksi-4-metoksi benzofenon (oksibenzon)	277,76	277 - 287	UV-C
2.	2-hidroksi-4,4'-metoksi benzofenon	277,44	277 - 287	UV-C
3.	2-hidroksi-4-metoksi-4'-heksoksi benzofenon	277,28	277 - 287	UV-C
4.	2,2'-dihidroksi-4 metoksi benzofenon	283,93	284-294	UV-B
5.	2,2'-dihidroksi-4,4' dimetoksi benzofenon	283,41	283-293	UV-B
6.	2,2'-dihidroksi-4 heksoksi benzofenon	283,78	284-294	UV-B
7.	2,2'-dihidroksi-4 metoksi-4' heksoksi benzofenon	283,46	284-294	UV-B

Pada Tabel 4 juga disajikan penggolongan tipe senyawa tabir surya yang telah dihasilkan. Untuk empat senyawa turunan oksibenzon dengan 2 hidroksi tergolong senyawa tabir surya tipe B, sedangkan senyawa oksibenzon dengan 1 hidroksi tergolong senyawa tabir surya tipe C. Dengan demikian senyawa tersubstitusi dapat memperbaiki aktivitas senyawa oksibenzon, karena umumnya yang banyak digunakan dalam kehidupan sehari-hari adalah senyawa tabir surya tipe B.

Tinjauan dari segi tipe senyawa tabir surya tersebut sudah cukup membantu dalam hal desain senyawa tabir surya yang diinginkan. Meskipun akurasi yang dihasilkan tidak terlalu memuaskan, tetapi arahan tipe senyawa tabir surya yang dihasilkan sudah cukup membantu.

KESIMPULAN

1. Desain senyawa tabir surya turunan oksibenzon dapat dilakukan dengan cukup baik menggunakan metode kimia komputasi berdasarkan perhitungan daerah serapan maksimum sinar UV teoritik untuk memperkirakan tipe aktivitas senyawa.
2. Penggantian rantai alkil tertentu tidak mengakibatkan perubahan tipe aktivitas senyawa tabir surya secara berarti, tetapi dapat menyebabkan perubahan hidrofobisitas yang cukup berarti yang diperlihatkan dari nilai log P.

3. Substitusi gugus kimia (hidroksi) pada cincin fenil akan berakibat terjadinya pergeseran panjang gelombang maksimum senyawa.

DAFTAR PUSTAKA

- Anonim, 1996, *HyperChem 6.0 for Windows*, Hypercube, Ontario.
- Finnen, M.J., 1987, Skin Metabolism by Oxydation and Conjugation, *J. Pharmacol. Skin*, 72, 4, 69-88.
- Kimbrough, D.R., 1997, The Photochemistry of Sunscreens, *J. Chem. Ed.*, 74, 1, 5-53.
- Leach, A.R., 1996, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, Longman, London.
- Rasanti, 1997, Sun Protecting Cosmetic Compositions Comprising Derivatives of Dibenzoyl Methane and of Benzophenone, *U.S. Patent Documents* 5639446, 424/59.
- Saliba, 2001, The Use of Sunscreen, <http://www.cpskincare.com/drs-082001.php>.
- Tahir, I., Siswandari, A., Raharjo, T.J., Wahyuningsih, T.D., dan Noegrohati, S., 2000, Desain Senyawa Tabir Surya Turunan Alkil Sinamat Berdasarkan Pendekatan Kimia Komputasi, *Prosiding Seminar Nasional Masyarakat Kimia Fisik I*, Unibraw-Malang.
- Walters, C., Keeney, A., Wigal, C.T., Johnston, and Cornelius, C.R., 1997, The Spectrophotometry Analysis and Modelling of Sunscreen, *J. Chem. Ed.*, 74, 1, 89-102.