

**ANALISIS SPEKTRA TRANSISI ELEKTRONIK BENTUK DIMER SENYAWA  
TABIR SURYA AVOBENZON DAN OKSIBENZON AKIBAT PENGARUH  
INTERAKSI IKATAN HIDROGEN**

***ELECTRONIC TRANSITION SPECTRA ANALYSIS OF DIMER COMPOUNDS OF  
AVOBENZONE AND OXYBENZONE AS SUNSCREEN COMPOUNDS :  
EFFECTING BY HYDROGEN BOND***

**Iqmal Tahir, Karna Wijaya, Tutik Dwi Wahyuningsih, Ari Ahmadi**

*Pusat Kimia Komputasi Indonesia Austria, Jurusan Kimia,  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Sekip Utara, Jogjakarta 55281  
Email : iqmal@ugm.ac.id*

**INTISARI**

*Telah dilakukan kajian semiempirik terhadap spektra transisi elektronik akibat pengaruh interaksi ikatan hidrogen bentuk dimer senyawa tabir surya avobenzon dan oksibenzon. Tujuan penelitian adalah untuk mengkoreksi hasil pemodelan senyawa guna menghasilkan data aktivitas tabir surya prediksi yang lebih akurat relatif terhadap data eksperimen. Kajian dilakukan dengan pembuatan model senyawa dan dilakukan langkah optimasi geometri menggunakan metode semiempirik PM3 yang dilanjutkan dengan perhitungan spektra transisi elektronik menggunakan metode ZINDO/s. Interaksi ikatan hidrogen yang menjadi obyek penelitian adalah bentuk dimer molekul senyawa tabir surya. Hasil kajian menunjukkan bahwa molekul avobenzon tidak memungkinkan bentuk dimer, sedangkan pada oksibenzon dapat terjadi. Adanya interaksi dimer ikatan hidrogen pada oksibenzon ini memberikan pergeseran nilai  $\lambda_{maks}$  ke arah pergeseran merah dan disertai perubahan jumlah transisi UV yang terjadi. Pergeseran yang terjadi relatif tidak signifikan mendekati nilai hasil eksperimen.*

Kata kunci: *pemodelan molekul, senyawa tabir surya, transisi elektronik*

**ABSTRACT**

*Semiempirical study to analyze electronic transition spectra of dimer structure of avobenzone and oxybenzone as sunscreen compounds has been done. The aim of the study is to get more accurate sunscreen compounds modeling so that would gave better sunscreen activities prediction comparing with experimental data. The alternative modeling was done in dimer configuration of the compounds that would be possible. This study was performed by using semiempirical method PM3 followed by electronic transition spectral analysis that was calculated by ZINDO/s method. The result showed that only for oxybenzone that would be formed and improved to give the red shift of the electronic transition spectra, although it was not significantly close to experimental data.*

Keywords: *molecular modeling, sunscreen compound, transition electronic*

## PENDAHULUAN

Tabir surya merupakan suatu bahan yang mempunyai kemampuan untuk melindungi kulit dari bahaya radiasi sinar ultra violet (UV) yang berasal dari paparan sinar matahari. Senyawa tabir surya menjadi alternatif pencegahan yang digunakan para ahli kesehatan dalam perlindungan kulit dengan kemampuan sebagai *photoprotection* tersebut. Sebagian besar penelitian terbaru tentang tabir surya ditujukan untuk mendesain dan menemukan produk atau senyawa baru yang memiliki kemampuan perlindungan yang lebih baik dengan efek samping yang seminimal mungkin. Desain tabir surya ditujukan agar senyawa tersebut mampu melakukan mekanisme pencegahan yang efektif terhadap paparan tiga jenis sinar UV yaitu sinar UV-A ( $\lambda=320-400$  nm), sinar UV-B ( $\lambda = 290-320$  nm) dan sinar UV-C ( $\lambda = 200 - 290$  nm).

Pengembangan senyawa tabir surya dapat dilakukan secara eksperimen dan secara pendekatan pemodelan. Hasil eksperimen akan memberikan hasil yang akurat namun membutuhkan waktu dan biaya yang relatif lebih besar bila dibandingkan dengan pemodelan menggunakan teknik kimia komputasi. Dengan pemodelan akan dapat diperoleh perkiraan mengenai sifat senyawa model dengan biaya rendah dan waktu yang singkat, namun untuk dapat memberikan data yang akurat akan sangat bergantung pada pendekatan teoritik yang dilakukan (Leach, 2001).

Pemodelan senyawa tabir surya telah dilakukan oleh Tahir *et al.* (2002), yang memodelkan senyawa alkil salisilat dengan variasi substituen. Optimasi geometri yang adalah dengan menggunakan metode semiempirik Austin Model 1 (AM1) yang dilanjutkan dengan perhitungan spektra elektronik untuk mengetahui tipe aktivitas tabir surya dari tiap senyawa yang telah dimodelkan menggunakan metode semiempirik ZINDO/s. Dalam penelitian ini disimpulkan bahwa substitusi alkil salisilat tidak memberikan perubahan pergeseran panjang gelombang serapan dari senyawa.

Penggunaan metoda semiempirik ZINDO telah berhasil digunakan oleh Diaz *et al* (2002) pada kajian spektra transisi senyawa khromofor vialcein. Sebelumnya Walters *et al.* (1997) telah melakukan pemodelan terhadap beberapa molekul tabir surya yaitu : oktil metoksisinamat, oksibenzon, oktil salisilat dan oktokrilen. Kajian dilakukan terhadap spektra transisi elektronik molekul tunggal senyawa tabir surya dengan menggunakan metode ZINDO. Setelah dibandingkan dengan data eksperimen

disimpulkan bahwa data hasil penghitungan spektra elektronik memiliki nilai panjang gelombang serapan maksimum  $\pm 10$  nm dari data eksperimen.

Kemampuan suatu senyawa tabir surya dalam melindungi kulit dari paparan sinar UV relatif identik dengan panjang gelombang serapan maksimum yaitu panjang gelombang dengan intensitas absorpsi maksimum. Hal tersebut akan tergantung pada struktur elektronik dari setiap senyawa dengan karakter khromofor yang dimiliki (Sastrohamidjojo, 1991). Untuk menentukan panjang gelombang maksimum dapat dilakukan secara eksperimen dan juga secara komputasional dengan penentuan spektra transisi elektronik senyawa. Namun hasil perbandingan yang dilakukan oleh Walters *et al.* (1997) menunjukkan bahwa terdapat perbedaan antara panjang gelombang eksperimen dan panjang gelombang hasil prediksi secara kimia komputasi. Fenomena tersebut menunjukkan adanya perbedaan kondisi antara eksperimen dengan pendekatan kimia komputasi yang dilakukan. Namun perbedaan sedikit saja dalam panjang gelombang akan menyebabkan perubahan yang drastis dalam efektivitas tabir surya.

Senyawa berpotensi tabir surya sebagian besar merupakan senyawa organik yang memiliki gugus-gugus kromofor yang mampu menyerap sinar UV. Selain itu senyawa berpotensi tabir surya organik pada umumnya memiliki gugus atom hidrogen bermuatan parsial positif dan gugus atom bermuatan parsial negatif. Dengan demikian dimungkinkan terjadinya interaksi antara dua molekul molekul atau antara molekul senyawa tabir surya dengan molekul pelarut berupa interaksi ikatan hidrogen. Interaksi tersebut dikarenakan adanya transfer muatan yang dapat menyebabkan berubahnya konfigurasi elektronik molekul berpotensi tabir surya.

Konfigurasi dimer senyawa berpotensi tabir surya telah dilakukan oleh Damayanti (2003) terhadap senyawa *mycosporine-like amino acid* (MAAs) dengan menggunakan metode semi empirik AM1 dan PM3 dan dilanjutkan dengan perhitungan spektra elektronik menggunakan ZINDO/s. Dari penelitian ini disimpulkan bahwa pembentukan dimer ikatan hidrogen menyebabkan pergeseran nilai  $\lambda_{\text{maks}}$  teoritik yang dapat mendekati nilai  $\lambda_{\text{maks}}$  eksperimen. Pemodelan struktur dimer ini juga telah dilakukan oleh Enrique *et al* (2000) pada struktur dimetilamina.

Bures dan Bezus (1994), telah melakukan kajian terhadap metode komputasi yang digunakan dalam mempelajari ikatan hidrogen dalam molekul asam karboksilat antara

AM1 dan PM3. Dari kajian tersebut diperoleh kesimpulan bahwa metode AM1 gagal dalam memberikan gambaran mengenai sistem dengan ikatan hidrogen yang kuat, dan metode PM3 dapat memberikan perkiraan ikatan hidrogen yang relatif lebih baik.

Oleh karena itu agar pemodelan senyawa tabir surya dapat memberikan hasil dan data dengan sesedikit mungkin mengandung penyimpangan maka pemodelan yang dilakukan dapat memberikan gambaran sedekat mungkin dengan kondisi eksperimen. Hal ini dapat dilakukan dengan mengkaji pengaruh ikatan hidrogen pada interaksi intermolekular senyawa tabir surya. Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi bagi perkembangan kimia komputasi dalam melakukan pemodelan senyawa tabir surya.

Penelitian ini bertujuan untuk (1) Melakukan pemodelan beberapa struktur senyawa avobenzon dan oksibenzon yang berpotensi sebagai berpotensi tabir surya dengan menggunakan pendekatan kimia komputasi semiempirik PM3 dan (2) Melakukan kajian terhadap spektra transisi elektronik senyawa tabir surya secara teoritik menggunakan metode semiempirik ZINDO/s sebagai pengaruh interaksi ikatan hidrogen pada konfigurasi dimer.

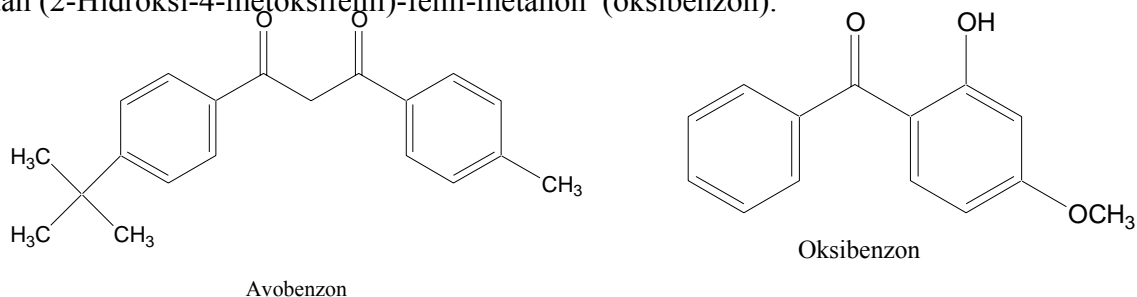
## METODE PENELITIAN

### a. Peralatan dan obyek penelitian

Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini adalah :

1. Perangkat keras berupa satu unit komputer dengan spesifikasi: Prosesor Pentium 4 1,4 GHz, memori SDRAM 256 MB, dan HD 20 GB.
2. Perangkat lunak kimia komputasi HyperChem™ versi 6.0 berbasis Windows

Pada penelitian ini model senyawa (Gambar 1) yang digunakan sebagai obyek penelitian adalah 1-(4-tert-Butil-fenil)-3-(4-metoksi-fenil)-propan-1,3-dion (avobenzon) dan (2-Hidroksi-4-metoksifenil)-fenil-metanon (oksibenzon).



Gambar 1. Struktur senyawa berpotensi tabir surya yang digunakan

## **b. Prosedur Penelitian**

### ***Optimasi geometri dengan metode PM3***

Setiap senyawa berpotensi tabir surya yang menjadi obyek penelitian dibuat struktur 2D dengan paket perangkat lunak *Hyperchem*<sup>TM</sup> versi 6.0 selanjutnya dilengkapi dengan atom hidrogen pada setiap atom untuk melengkapi struktur sebenarnya dan kemudian dibentuk menjadi struktur 3D. Proses dilanjutkan dengan optimasi geometri struktur berupa minimisasi energi struktur untuk memperoleh konformasi struktur terstabil dengan menggunakan metoda semiempirik PM3. Batas konvergensi ditentukan berdasarkan pengamatan orientasi yaitu telah mencapai batas gradien perubahan energi sebesar  $0,001 \text{ kkal}/(\text{\AA} \cdot \text{mol})$  mencapai batas gradien sekawan. Metoda optimasi berdasarkan metoda Polak-Ribiere.

### ***Penentuan spektra elektronik dengan ZINDO/s***

Struktur hasil optimasi geometri menghasilkan struktur senyawa berpotensi tabir surya terstabilkan, selanjutnya untuk mengetahui spektra transisi elektronik senyawa dilakukan perhitungan *single point* menggunakan metode semiempirik ZINDO/s. Perhitungan dilakukan dengan menjalankan secara bersamaan *Restricted Hatree-Fock* (RHF) dengan *Configuration Interaction (CI)-single excited* dengan batasan orbital HOMO dan LUMO masing-masing 5. Setelah perhitungan dijalankan akan dihasilkan spektrum transisi elektronik berupa panjang gelombang dan intensitas serapan berupa kekuatan osilasi yang berupa diagram spektra diskontinyu.

Hasil analisis dilakukan tinjauan terhadap nilai transisi elektronik yang berada pada daerah serapan sinar UV yang dikelompokkan ke dalam UV-A (320-400 nm), UV-B (290-320 nm) dan UV-C (200-290 nm). Pemilihan nilai panjang gelombang maksimum ditentukan dengan intensitas serapan tertinggi yang kemudian dijadikan acuan aktivitas teoritik senyawa berpotensi tabir surya.

### ***Kajian interaksi ikatan hidrogen senyawa tabir surya***

Kajian interaksi ikatan hidrogen senyawa berpotensi tabir surya dilakukan dalam fasa gas. Kajian ini difokuskan pada interaksi ikatan hidrogen intermolekular antara

sesama molekul senyawa berpotensi tabir surya atau yang disebut dimer dan interaksi antara senyawa tabir surya dengan molekul pelarutnya.

Interaksi ikatan hidrogen dilakukan dengan beberapa tahap. Pertama, dibuat *cut off* panjang ikatan sebesar  $>3,2$  nm dan sudut ikatan  $D-H\cdots A$  sebesar  $90^\circ < \theta < 180^\circ$  (Pradipta, 2000). Selanjutnya dilakukan dua jenis optimasi geometri, yaitu menggunakan optimasi geometri parsial dan optimasi geometri global, menggunakan metoda PM3 dengan algoritma Polak-Ribiere akan memberikan estimasi ikatan hidrogen dengan ketelitian tinggi dan kebutuhan waktu untuk mencapai energi geometri teroptimasi yang relatif cepat (Bures dan Bezus, 1994) dengan batas gradien  $0,001$  kkal/(Å.mol). Tahap ketiga, setelah dilakukan optimasi geometri global dilakukan kajian terhadap spektra elektronik secara *single point* menggunakan metoda ZINDO/s. Tahap keempat, adalah analisis data hasil optimasi geometri yang berupa data energi, sifat molekular dan panjang gelombang maksimum dari spektra elektronik masing-masing dimer dan interaksi dengan molekul pelarut senyawa berpotensi tabir surya.

Dimer senyawa tabir surya dibentuk dengan cara penataan sedemikian rupa gugus-gugus fungsi yang berpotensi untuk membentuk ikatan hidrogen sehingga setelah dilakukan *Recompute Hydrogen Bond* terlihat adanya interaksi ikatan hidrogen dengan visualisasi garis putus-putus. Interaksi dengan molekul pelarut penentuan jumlah molekul pelarut disesuaikan dengan jumlah gugus fungsi berpotensi ikatan hidrogen yang terdapat pada molekul berpotensi tabir surya. Selanjutnya dilakukan hal yang sama seperti pada pembentukan model dimer senyawa tabir surya. Dalam kajian ini ditentukan nilai entalpi pembentukan ( $\Delta H_f$ ) ikatan hidrogen melalui persamaan :

$$\Delta H_{f \text{ ikatan hidrogen}} = \Delta H_{f \text{ kompleks ikatan hidrogen}} - \sum \Delta H_{f \text{ molekul penyusun kompleks}}$$

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Pemodelan Senyawa Tabir Surya Keadaan Terisolasi

Pemodelan senyawa yang dikaji dilakukan pertama kali dalam keadaan molekul terisolasi. Data hasil optimasi geometri senyawa berpotensi tabir surya menggunakan metoda PM3 disajikan pada Tabel 1. Struktur senyawa tersebut merupakan hasil optimasi geometri berupa struktur dengan nilai energi yang minimal sehingga merupakan model senyawa yang semirip mungkin dengan senyawa sebenarnya.

Tabel 1. Data beberapa parameter komputasi metode PM3

Nama senyawa	Energi total ( $\times 10^4$ kkal/mol)	$\Delta H_f$ (kkal/mol)	Momen dwikutub (D)
Avobenzon	-8,28	-82,96	3,43
Oksibenzon	-6,28	-63,04	1,97

Data hasil perhitungan tersebut tidak memberikan makna secara berarti dalam kaitannya dengan pemodelan senyawa tabir surya. Data tersebut akan digunakan kembali untuk mendukung penjelasan beberapa fenomena yang terkait pada pembahasan berikutnya.

### **Kajian Spektra Elektronik Model Senyawa Sabir Turya**

Spektra hasil eksperimen yang dilakukan dengan menggunakan spektrofotometer UV-Vis akan bersifat kontinu dan hal ini berbeda dengan spektra transisi elektronik dari perhitungan semiempirik yang memiliki sifat diskontinu. Hal ini dikarenakan cara perolehan masing-masing spektra berbeda. Pada spektrofotometri UV-Vis suatu senyawa dicacah dengan panjang gelombang tertentu dan kemudian intensitas pada proses tadi dicatat dalam suatu kurva serapan. Hasil perhitungan dengan metode ZINDO/s yang menggunakan pendekatan RHF dengan menjalankan perhitungan *CI-single excited* akan melakukan pengukuran masing-masing selisih energi dari tiap keadaan transisi yang kemudian intensitasnya dihitung menggunakan persamaan tertentu. Hal ini menyebabkan data hasil perhitungannya pun menjadi data yang bersifat insidental pada tingkat energi tertentu dan menjadikan ketidakkontinyuan data. Hasil perhitungan spektra transisi elektronik senyawa oksibenzon disajikan pada Tabel 2.

Senyawa tabir surya memiliki kemampuan menyerap sinar UV pada panjang gelombang tertentu sebagai akibat dari adanya gugus-gugus fungsional yang dapat menghasilkan transisi elektronik yang besar energinya sesuai dengan rentang energi sinar UV. Tiap transisi memiliki intensitas yang berbeda dalam menyerap sinar UV dan yang menjadi acuan dari kemampuan suatu tabir surya dalam menyerap sinar UV adalah panjang gelombang serapan sinar UV dengan intensitas maksimal atau yang biasa disebut panjang gelombang serapan maksimal. Untuk membandingkan akurasi metode PM3 maka data panjang gelombang transisi yang dihasilkan dari perhitungan spektra transisi

menggunakan metode ZINDO/s terhadap molekul teroptimasi dibandingkan dengan data hasil eksperimen.

Tabel 2. Data komparasi nilai  $\lambda_{\text{maks}}$  hasil optimasi geometri dan data eksperimen

Nama senyawa	Panjang gelombang serapan maksimum (nm)	
	Opt. PM3-ZINDO/s	Eksperimen (Walters, <i>et al.</i> 1997)
Oksibenzon <sup>a</sup>	268,97	288
	306,63	326

Nilai  $\lambda$  yang dihasilkan oleh optimasi geometri menggunakan metode PM3 yang dilanjutkan dengan perhitungan spektra transisi elektronik menggunakan metode semiempirik ZINDO/s, menunjukkan nilai  $\lambda$  yang berbeda cukup signifikan dengan nilai  $\lambda$  yang diperoleh secara eksperimen. Perbedaan yang cukup signifikan ini dapat dikarenakan perbedaan kondisi sistem. Pada perhitungan secara kimia komputasi hanya mengukur spektra transisi elektronik suatu senyawa pada keadaan tunggal dalam fasa gas sedangkan dalam eksperimen kondisi sistem pengukuran spektra serapan sinar UV suatu senyawa berada dalam suatu pelarut tertentu yang dalam hal ini digunakan pelarut etanol. Intensitas serapan dalam spektra elektronik secara komputasi berupa kekuatan osilasi yang merupakan ukuran momen dwikutub transisi yang dihubungkan dengan pergeseran muatan yang terjadi ketika distribusi ulang elektron berlangsung (Atkins, 1994). Dengan demikian jika fungsi gelombang molekul diketahui maka nilai intensitas serapan dapat diketahui secara teoritik. Pada Tabel 2 disajikan beberapa nilai intensitas serapan maksimum yang ditunjukkan untuk senyawa oksibenzon. Terlihat bahwa antara panjang gelombang serapan maksimum untuk eksperimen dan hasil perhitungan relatif berbeda. Penelitian selanjutnya dilakukan dengan melakukan langkah koreksi menggunakan interaksi antar molekul dalam keadaan dimer yang terjadi akibat melibatkan ikatan hidrogen.

### **Kajian Interaksi Ikatan Hidrogen Pada Senyawa Tabir Surya**

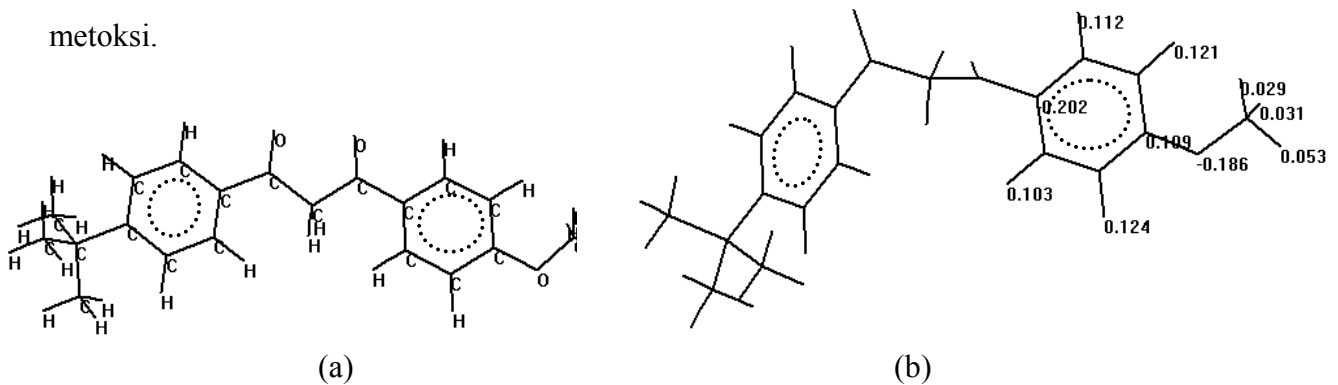
Kajian interaksi ikatan hidrogen dilakukan dengan cara mengestimasi interaksi yang mungkin terjadi berdasarkan gugus-gugus aktif berpotensi ikatan hidrogen yang terdapat pada molekul senyawa tabir surya. Setelah itu dilakukan penataan molekul sedemikian rupa sehingga setelah dilakukan *recompute hydrogen bond* interaksi dapat divisualisasikan dengan garis putus-putus dan dilanjutkan dengan optimasi terhadap sistem secara keseluruhan. Dalam kajian ini ikatan hidrogen dapat terlihat setelah



dilakukan perhitungan ulang ikatan hidrogen (*recompute hydrogen bond*). Ikatan hidrogen akan terbentuk apabila memenuhi persyaratan jarak antar hidrogen dengan atom berpotensi negatif tidak lebih dari 3,2 Å dan sudut ikatan hidrogen yang terbentuk harus lebih besar dari 120° (Pop dan Brewster, 1997).

### Analisis pada senyawa avobenzon

Struktur avobenzon sebagaimana terlihat pada Gambar 2(a) memiliki dua gugus karbonil dan satu gugus metoksi yang tersubstitusi pada cincin fenil serta satu atom H yang diduga bermuatan parsial positif yang berada pada gugus metoksi. Hal ini memungkinkan terjadinya interaksi ikatan hidrogen intermolekuler sebagai dimer antara atom  $O^{\delta-}$  pada gugus karbonil dan metoksi dengan atom  $H^{\delta+}$  yang ada pada gugus metoksi.



Gambar 2 (a) Struktur senyawa avobenzon dan (b) struktur elektronik avobenzon hasil optimasi metode PM3

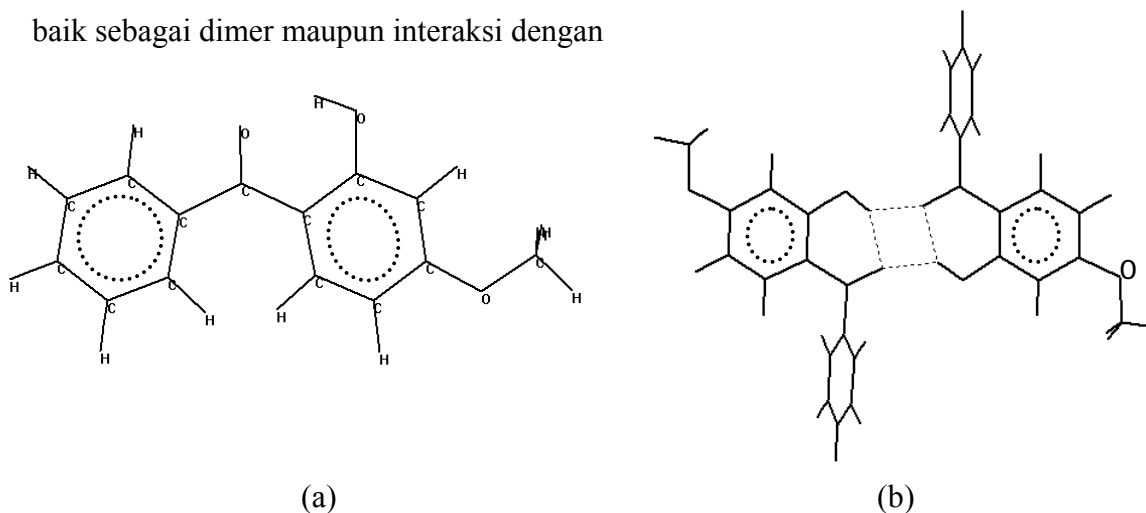
Kajian semiempirik metode PM3 terhadap konfigurasi dimer ikatan hidrogen gagal untuk menunjukkan terjadinya interaksi dimer ikatan hidrogen sebagaimana telah diperkirakan sebelumnya. Hal ini dapat dikarenakan muatan atom  $H^{\delta+}$  yang kurang positif sehingga interaksi elektrostatis untuk terjadinya ikatan hidrogen tidak terpenuhi. Seperti terlihat pada Gambar 2(b) nilai muatan atom  $H^{\delta+}$  pada gugus metoksi hanya sebesar 0,053 Coulomb. Nilai tersebut lebih kecil dibandingkan nilai muatan atom hidrogen yang terikat pada cincin fenil. Dengan demikian kecil kemungkinan terjadi interaksi yang dapat menyebabkan terbentuknya ikatan hidrogen. Pemodelan pada senyawa avobenzon disajikan berupa spektra transisi untuk molekul tunggal saja (Tabel 3).

Tabel 3 Spektra transisi elektronik molekul avobenzon

Molekul avobenzon tunggal	
$\lambda$ (nm)	intensitas
211,61	0,030
221,59	0,002
237,69	0,205
240,76	0,490
259,20	0,026
268,43	0,015
276,12	0,012

### b. Senyawa oksibenzon

Oksibenzon merupakan senyawa tabir surya yang memiliki dua cincin fenil yang dihubungkan dengan sebuah gugus karbonil sebagaimana terlihat pada Gambar 3 (a). Pada struktur oksibenzon terlihat memiliki gugus karbonil, hidroksi dan metoksi yang berada pada bidang datar yang berpotensi untuk membentuk interaksi ikatan hidrogen baik sebagai dimer maupun interaksi dengan



Gambar 3. Struktur oksibenzon dalam keadaan tunggal (a) dan dalam model dimer (b)

Kajian mengenai bentuk dimer senyawa oksibenzon menunjukkan adanya interaksi hidrogen antar molekul oksibenzon yang terjadi antara gugus hidroksi dengan gugus karbonil dengan bentuk ikatan siklis sebagaimana terlihat pada Gambar 3 (b). Konfigurasi dimer ikatan hidrogen oksibenzon memperlihatkan adanya perubahan struktur geometri dimana struktur geometri molekul tunggal oksibenzon hasil pemodelan menggunakan metode PM3 menunjukkan sebuah bidang datar namun pada konfigurasi dimer struktur datar tersebut terjadi rotasi geometri pada ikatan sigma antara atom C

karbonil dengan cincin fenil yang tidak tersubstitusi. Dengan sudut torsi CCCO awal mendekati  $0^\circ$  dan setelah membentuk dimer menjadi  $105,61^\circ$ . Konfigurasi ini memiliki nilai energi total sebesar  $-125.623,5$  kkal/mol,  $\Delta H_f$  sebesar  $-138,12$  dan nilai momen dwikutub sebesar  $0,1934$  D. Dengan nilai  $\Delta H_f$  molekul tunggal sebesar  $-63,04$  kkal/mol maka nilai  $\Delta H_f$  ikatan hidrogen total sebesar  $-12,04$  kkal/mol.

Data kajian pengaruh konfigurasi interaksi ikatan hidrogen terhadap spektra transisi elektronik pada daerah UV ditampilkan pada Tabel 4 dengan perubahan nilai  $\lambda_{maks}$  dari  $271,27$  nm pada molekul tunggal menjadi  $275,01$  nm pada konfigurasi dimer.

Tabel 4. Data transisi elektronik daerah UV beberapa konfigurasi molekul oksibenzon

Molekul oksibenzon tunggal		Molekul oksibenzon dimer	
$\lambda$ (nm)	Intensitas	$\lambda$ (nm)	Intensitas
		201,96	0,196
		203,72	0,637
		206,89	0,087
213,12	0,405	208,49	0,449
216,80	0,033		
229,22	0,122	229,41	0,179
		238,70	0,150
245,44	0,150	241,19	0,127
271,27	0,415	275,01	0,956
279,23	0,232		
306,00	0,221		

### Kajian Kualitatif Pengaruh Interaksi Ikatan Hidrogen

Hasil perhitungan teoritik spektra transisi elektronik menggunakan teknik kimia komputasi semiempirik terhadap konfigurasi senyawa tabir surya oksibenzon menunjukkan bahwa telah terjadi pergeseran terhadap nilai transisi elektronik konfigurasi tersebut. Pemodelan senyawa oksibenzon tersebut menunjukkan fenomena pergeseran merah sebagai akibat interaksi ikatan hidrogen. Pergeseran merah pada senyawa tabir surya yang mengalami interaksi ikatan hidrogen dapat dikarenakan adanya efek dari interaksi dipol-dipol pada suatu molekul dengan dipol-dipol dari molekul yang lain sehingga menyebabkan penurunan tingkat energi tereksitasi. Hal ini karena pada saat tereksitasi keadaan suatu senyawa akan menjadi lebih polar dan apabila berinteraksi dengan dipol-dipol molekul lain yang memiliki muatan berlawanan maka mengakibatkan kestabilan molekul senyawa tersebut meningkat sehingga energinya menjadi turun.

Pada kajian yang dilakukan pembentukan konfigurasi dimer ikatan hidrogen antar molekul senyawa tabir surya mengakibatkan perubahan terhadap transisi elektronik. Pada senyawa tabir surya oksibenzon yang membentuk konfigurasi dimer akan memiliki jumlah transisi elektronik yang lebih banyak pada spektra transisi yang dihasilkan relatif dibandingkan dengan spektra molekul tunggal. Spektra transisi elektronik konfigurasi dimer ikatan hidrogen menunjukkan terdapat transisi-transisi baru dimana pada spektra transisi elektronik molekul tunggal transisi-transisi tersebut tidak terjadi.

## KESIMPULAN

1. Kajian teoritik mengenai spektra transisi molekul tunggal senyawa berpotensi tabir surya yang menjadi obyek penelitian dengan optimasi geometri menggunakan metode semiempirik PM3 dan dilanjutkan dengan perhitungan *single-point* metode ZINDO/s masih memiliki perbedaan nilai  $\lambda_{\text{maks}}$  secara signifikan dengan data eksperimen.
2. Konfigurasi dimer senyawa oksibenzon melalui ikatan hidrogen telah menyebabkan pergeseran nilai  $\lambda$  dan penambahan jumlah transisi elektronik teoritik senyawa berpotensi tabir surya, namun nilai pergeseran tersebut belum signifikan untuk mendekati data eksperimen.

## DAFTAR PUSTAKA

- Anonim, 1996, *Hyperchem™ Release 5 for Windows : Reference Manual*, Hypercube Inc., Ontario.
- Atkins, P.W., 1994, *Kimia Fisika*, Jilid 2 (terjemahan oleh Kartohadiprodjo), Edisi Keempat, Erlangga, Jakarta.
- Bures, M., and Bezus, J., 1994, Study of Hydrogen Bonding in Carboxylic Acids by The MNDO Methods, *Czechk Chem Com*, 59,6,1251-1260.
- Damayanti, R., 2003, *Pemodelan Molekul Senyawa MAAS-glisin Sebagai Penyerap Sinar UV*, Skripsi, FMIPA UGM, Jogjakarta.
- Diaz, L.C., Neto, J.D, Rettori, D., and Duran, N., 2002, Semiempirical INDO/s Study on the Absorption Spectrum of Violacein, *J Mol. Struct.*, 580,85-90,
- Enrique, M., Lago, C., and Rios M.A., 2000, An *Ab Initio* Study of Interaction in Dimethylamine Dimer and Trimer, *J. Chem. Phys.*, 113,21, 9523-9531.
- Leach, A.R., 2001, *Molecular Modeling: Principle and Application*, Pearson Education Limited, Harlow.
- Pop, E., and Brewster, M.E., 1997, Dimerization of Dexanabiol by Hydrogen Bonding Accounts for its Hydrophobic Character, *Int. J. Quant. Chem.*, 65, 1057 – 1064.

- Pradipta, M.F., 2000, *Studi Konformasi dan Ikatan Hidrogen Etil Metil Amonium-Dimetansulfonamidat dengan Metode MM dan Semiempirik*, Skripsi, FMIPA UGM, Yogyakarta.
- Sastrohamidjojo, H., 1991, *Spektroskopi*, Liberty, Yogyakarta.
- Tahir, I., Wijaya, K., dan Subarni, 2002, Pemodelan Senyawa Alkil Salisilat Sebagai Penyerap Sinar UV Berdasarkan Pendekatan Transisi Elektronik Hasil Perhitungan Mekanika Kuantum Semiempirik ZINDO/s, *Indon. J Chem*, 2 53-59.
- Tahir, I., Wijaya, K., Falah, I.I., dan Damayanti, R., 2004, *Pemodelan Molekul Senyawa Mycosporine-Like Amino Acids (MAAs-Like) Sebagai Senyawa Penyerap Sinar UV*, Prosiding Seminar Nasional MIPA 2004, Semarang 4 Desember 2004.
- Walters, C., Keeney, A., Wigal, C.T., Johnston, C.R., and Cornelius, R.D., 1997, Spectroscopy Analysis and Modelling of Sunscreens, *J. Chem. Educ.*, 74, 1, 99 – 101.