

PREDIKSI TIPE AKTIVITAS SENYAWA TABIR SURYA HOMOSALAT BERDASARKAN ANALISIS SPEKTRA TRANSISI ELEKTRONIK PADA KONFIGURASI BENTUK DIMER DAN SOLUT-SOLVEN

Prediction of Sunscreen Activity of Homosalate Compounds Based on Electronic Transition Spectral Analysis with Dimer and Solute-Solvent Configurations

Iqmal Tahir^{*}, Karna Wijaya dan Ari Ahmadi

*Austrian Indonesian Centre for Computational Chemistry, Jurusan Kimia
Fakultas MIPA, Universitas Gadjah Mada, Sekip Utara, Yogyakarta 55281*

^{*}Contact person : telp /fax : 0274-545188; email : iqmal@ugm.ac.id

ABSTRAK

Prediksi tipe aktivitas senyawa tabir surya homosalat telah dilakukan dengan berdasarkan analisis spektra transisi elektronik. Langkah kajian dilakukan berupa pemodelan senyawa homosalat dalam bentuk dimer dan interaksi dengan pelarut. Kajian dilakukan dengan langkah optimasi geometri menggunakan metode semiempirik PM3 yang dilanjutkan dengan analisis spektra transisi elektronik menggunakan metode ZINDO/s. Interaksi ikatan hidrogen yang menjadi obyek penelitian adalah bentuk dimer molekul senyawa tabir surya dan ikatan hidrogen antara molekul pelarut dengan molekul senyawa tabir surya pada gugus-gugus berpotensi membentuk ikatan hidrogen. Hasil kajian secara umum menunjukkan pengaruh interaksi ikatan hidrogen memberikan kecenderungan pergeseran merah namun besarnya nilai pergeseran tidak signifikan mendekati nilai hasil eksperimen. Faktor interaksi dimer ikatan hidrogen antara dua molekul homosalat memberikan pergeseran nilai λ_{maks} dengan disertai perubahan jumlah transisi UV yang terjadi. Konfigurasi ikatan hidrogen antara homosalat dengan etanol menyebabkan terjadinya pergeseran nilai λ_{maks} namun jumlah transisi UV yang terjadi relatif tidak berubah.

Kata kunci : pemodelan molekul, tabir surya, homosalat, ikatan hidrogen

ABSTRACT

Prediction of sunscreen activity of homosalate compounds based on electronic transition spectral analysis have been done. The study focused of the influence of hydrogen bond interaction to correct modeling strategy of sunscreen compounds. In this study the alternative of modeling was given by dimer configuration of compounds and hydrogen bond interaction of compounds with ethanol as solvent. This study was done by using semiempirical method i.e. PM3 and ZINDO/s method. The result of the study showed that the influence of hydrogen bond interaction in general give uniform tendency to the red shift of the electronic transition spectra of homosalate compounds. Existence of hydrogen bond interaction as dimer of sunscreens molecule caused λ_{max} shift accompanied by elevation of electronic transition spectra number. Furthermore the study of hydrogen bond interaction between homosalate and ethanol molecules also give λ_{max} shift but the number of electronic transition was not alter.

Keywords : molecular modeling, sunscreen, homosalate, hydrogen bonding

PENDAHULUAN

Penelitian tabir surya telah banyak dilakukan antara lain berupa langkah untuk mendesain dan menemukan produk atau senyawa tabir surya baru yang memiliki kemampuan melindungi dari paparan sinar ultra violet (UV) yang lebih baik dengan efek samping yang seminimal mungkin terhadap penggunaannya. Aplikasi selanjutnya adalah berupa formulasi bahan yang mempunyai kemampuan untuk melindungi kulit dari paparan sinar matahari yang berbahaya. Desain tabir surya ditujukan agar senyawa-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). Kemampuan tabir surya pada awalnya lebih ditujukan untuk mencegah paparan sinar UV-A dan UV-B karena sinar UV-C yang jauh lebih berbahaya secara alamiah telah diabsorpsi oleh lapisan atmosfer. Namun karena kerusakan lingkungan yang terjadi maka interupsi sinar UV-C disinyalir telah mencapai bumi dengan intensitas yang relatif kecil (Walters *et al.*, 1997). Dengan demikian dibutuhkan senyawa tabir surya yang sesuai dan dapat mencegah paparan sinar UV secara optimal.

Teknologi kimia komputasi saat ini dengan didukung kemajuan perangkat keras dan ketersediaan perangkat lunak untuk aplikasi pemodelan saat ini dapat digunakan untuk pengembangan riset tabir surya. Pengembangan senyawa tabir surya yang seharusnya dilakukan secara eksperimen, sekarang ini dapat lebih dioptimalkan dengan

menggunakan pendekatan pemodelan molekul menggunakan teknik perhitungan-perhitungan kimia komputasi. Hasil eksperimen jelas akan memberikan hasil yang lebih akurat dari suatu senyawa namun membutuhkan waktu dan biaya yang relatif lebih besar bila dibandingkan dengan pemodelan menggunakan teknik kimia komputasi. Berdasarkan pendekatan pemodelan akan dapat memberikan perkiraan mengenai sifat senyawa model dengan efisiensi biaya dan waktu meskipun ketepatan data akan sangat bergantung pada pendekatan teoritik yang dilakukan.

Walters *et al.* (1997) telah melakukan pemodelan terhadap beberapa molekul tabir surya yaitu : Oktil metoksisinamat, oksibenzon, oktil salisilat dan oktokriolen. Kajian dilakukan terhadap spektra transisi elektronik molekul tunggal senyawa tabir surya menggunakan perangkat lunak pemodelan molekul CAChe™ dengan menggunakan metode ZINDO. Setelah dibandingkan dengan data eksperimen disimpulkan bahwa data hasil penghitungan spektra elektronik memiliki nilai panjang gelombang serapan maksimum ± 10 nm dari data eksperimen. Pemodelan senyawa tabir surya juga telah dilakukan oleh Tahir *et al.* (2002), yang memodelkan senyawa alkil salisilat dengan berbagai kemungkinan substituen. Optimasi geometri dilakukan menggunakan metode semiempirik Austin Model 1 (AM1) yang dilanjutkan dengan perhitungan spektra elektronik untuk mengetahui panjang gelombang optimum 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. Rahmi dan Tahir (2005) melakukan teknik yang sama untuk senyawa turunan oksibenzon.

Kemampuan suatu senyawa tabir surya dalam melindungi kulit dari paparan sinar UV identik dengan panjang gelombang serapan maksimum yaitu panjang gelombang dengan intensitas absorpsi tertinggi atau maksimum. Hal tersebut tergantung pada struktur elektronik dari setiap senyawa (Sastrohamidjojo, 1991). Untuk menentukan besarnya panjang gelombang maksimum dapat dilakukan secara eksperimen dan juga secara komputasional dengan menentukan 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.

Supaya pemodelan senyawa tabir surya dapat memberikan data dengan sesedikit mungkin kandungan penyimpangan maka pemodelan harus dipilih sehingga dapat memberikan gambaran sedekat mungkin dengan kondisi eksperimen. Salah satu langkah yang dapat dilakukan adalah dengan mengkaji pengaruh interaksi intermolekular senyawa tabir surya yakni interaksi ikatan hidrogen. Interaksi tersebut akan sangat mungkin terjadi dalam suatu sistem yang mengandung senyawa tabir surya karena pada umumnya senyawa tabir surya adalah senyawa organik yang mengandung atom hidrogen

bermuatan parsial positif dan atom oksigen dengan muatan parsial negatif serta gugus fungsi yang berpotensi membentuk ikatan hidrogen. Kedua interaksi tersebut diduga berpengaruh terhadap spektra transisi elektronik senyawa tabir surya.

Senyawa berpotensi tabir surya sebagian besar merupakan senyawa organik yang memiliki gugus-gugus kromofor yang mampu menyerap sinar UV. Kemampuan ini dikarenakan terjadinya transisi elektronik dalam molekul tabir surya dimana energi transisi tersebut setara dengan energi 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.

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. Enrique et al. (2000), melakukan kajian terhadap interaksi dalam dimer dan trimer dimetilamin menggunakan metode HF, DFT/B3LYP dan MP2 *ab-initio* dengan basis set 6-31+G*. Dari hasil kajian diperoleh hasil bahwa interaksi

dengan adanya ikatan hidrogen antara N – H...N memberikan nilai energi interaksi sebesar -15 kJ/mol, dan mengubah panjang ikatan N – H sebesar 0,004 Å dalam konfigurasi dimer dan 0,009 Å dalam interaksi trimer.

Dimerisasi akibat ikatan hidrogen juga telah dilakukan oleh (Pop dan Brewster, 1997) yang meneliti dimerisasi deksanabinol akibat terjadinya ikatan hidrogen antar molekul. Konfigurasi dimer senyawa bepotensi 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 penelitiannya disimpulkan bahwa pembentukan dimer ikatan hidrogen menyebabkan pergeseran nilai λ_{maks} teoritik yang dapat mendekati nilai λ_{maks} eksperimen. Selain kajian terhadap dimer ikatan hidrogen interaksi juga terjadi antara molekul bepotensi tabir surya dengan pelarut. Kajian hal ini telah dilakukan oleh Diaz *et al.* (2002) yang melakukan kajian terhadap interaksi senyawa *violacein* dengan molekul metanol sebagai pelarut dan mendapatkan hasil bahwa efek etanol terhadap spektra elektronik *violacein* menyebabkan pergeseran biru terhadap panjang gelombang maksimum.

Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan perbaikan teknik pemodelan senyawa tabir surya, khususnya terkait obyek senyawa homosalat.

METODE PENELITIAN

Peralatan

Peralatan kimia komputasi yang digunakan dalam penelitian ini berupa perangkat keras berupa satu unit komputer dengan spesifikasi: Prosesor Pentium 4 1,4 GHz, memori SDRAM

256 MB, dan HD 20 GB, serta perangkat lunak kimia komputasi HyperChem™ versi 6.0 berbasis Windows

Obyek Penelitian

Pada penelitian ini model senyawa yang digunakan sebagai obyek penelitian adalah 3,3,5-trimetil-sikloheksil salisilat (homosalat) seperti disajikan pada gambar 1.

Prosedur Penelitian

Pada penelitian ini analisis dilakukan terhadap senyawa homosalat untuk mengetahui energi total hasil optimasi geometri, entalpi pembentukan (ΔH_f) dan spektra transisi elektronik. Pada kajian ini, untuk mencari struktur dengan energi total terendah dilakukan dengan cara optimasi geometri menggunakan metoda semiempirik PM3. Analisis transisi elektronik dilakukan dengan cara mempelajari panjang gelombang dan intensitas serapan dengan metoda ZINDO/s.

Optimasi geometri dengan metode PM3

Setiap model senyawa dibuat struktur 2D dengan paket perangkat lunak *Hyperchem*™ 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 kkal/(Å.mol) mencapai batas gradien sekawan. Metoda optimasi berdasarkan metoda Polak-Ribiere. Data hasil

perhitungan yang meliputi data mengenai energi dan struktur elektronik senyawa direkam pada menu log.

Penentuan spektra elektronik dengan ZINDO/s

Struktur hasil optimasi geometri menghasilkan struktur senyawa homosalat 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. Data hasil perhitungan disimpan dalam *file log*. Prosedur mengacu pada langkah yang telah dilakukan oleh Tahir *et al* (2004).

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 homosalat

Kajian interaksi ikatan hidrogen senyawa homosalat dilakukan dalam fasa gas. Kajian ini difokuskan pada interaksi ikatan hidrogen intermolekular antara dua molekul homosalat untuk membentuk supramolekul

bentuk dimer dan interaksi antara satu molekul homosalat dengan molekul-molekul etanol.

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.

Konfigurasi supramolekul bentuk dimer dari dua molekul homosalat 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 etanol dilakukan dengan variasi jumlah molekul etanol yang disesuaikan dengan jumlah gugus fungsi berpotensi ikatan hidrogen yang terdapat pada molekul homosalat. Langkah yang dilakukan mengikuti urutan seperti pada pembentukan model dimer senyawa tabir surya.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Kajian Spektra Elektronik Model Senyawa Homosalat Tunggal

Kajian kimia komputasi yang dilakukan terhadap senyawa homosalat ini akan memberikan data spektra diskrit/diskontinyu. Jika dibandingkan dengan spektra hasil eksperimen menggunakan spektrofotometer UV-Vis yang bersifat kontinyu, spektra transisi elektronik dari perhitungan semiempirik ini memiliki sifat yang diskontinyu dikarenakan cara pengukurannya yang berbeda. Pada spektrofotometri UV-Vis suatu senyawa dicacah dengan panjang gelombang tertentu dan kemudian intensitas pada proses tadi dicatat dalam suatu kurva serapan. Pada metode ZINDO/s menggunakan pendekatan RHF dengan menjalankan perhitungan *CI-single excited* yang diukur adalah 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 homosalat yang dilakukan dalam penelitian ini disajikan pada Tabel 1. Data pada Tabel 1 menunjukkan ukuran energi transisi dan intensitas serapannya. Hal tersebut dilakukan dengan cara melakukan perhitungan *CI-single excited* menggunakan metode ZINDO/s dengan tipe penghitungan *single point* sehingga struktur hasil optimasi yang telah dilakukan akan memberikan kontribusi yang tetap terhadap besarnya energi transisi pada spektra elektronik.

Intensitas serapan dalam spektra elektronik secara komputasi berupa kekuatan osilasi yang diperoleh dari persamaan 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.

Model Interaksi pada Senyawa Homosalat Bentuk Dimer dan Interaksi dengan Pelarut

Homosalat memiliki gugus hidroksi, karbonil dan gugus metoksi. Secara teoritik dan ditinjau dari konfigurasi maka gugus-gugus tersebut berpotensi untuk dapat membentuk ikatan hidrogen intra dan intermolekuler. Interaksi ikatan hidrogen intramolekuler akan terbentuk antara atom $H^{\delta+}$ hidroksi dengan atom $O^{\delta-}$ karbonil.

Pemodelan konfigurasi dimer senyawa homosalat menggunakan metode PM3 dapat menggambarkan pembentukan ikatan hidrogen, hal tersebut ditunjukkan pada Gambar 3. Pada Gambar 3 terlihat adanya interaksi ikatan hidrogen intra dan intermolekuler yang ditampilkan berbentuk siklis persegi empat. Konfigurasi tersebut memiliki nilai energi total sebesar -143.778,6 kkal/mol, ΔH_f sebesar -279,83 kkal/mol dan momen dwikutub sebesar 0,042 D. Jika nilai ΔH_f homosalat tunggal sebesar -138,80 kkal/mol maka ΔH_f ikatan hidrogen total pada konfigurasi dimer tersebut adalah -2,23 kkal/mol dan konfigurasi ini mampu untuk menurunkan sifat kepolaran senyawa homosalat yang ditunjukkan dengan nilai momen dwikutub yang rendah.

Kajian interaksi molekul homosalat dengan molekul etanol ditunjukkan pada Gambar 4. Pada gambar tersebut interaksi diasumsikan interaksi terjadi dengan tiga molekul etanol. Pada model tersebut metode semiempirik menunjukkan adanya ikatan hidrogen baik yang terjadi secara intra dan intermolekuler. Nilai energi total konfigurasi tersebut sebesar $-115.041,9$ kkal/mol, ΔH_f sebesar $-315,07$ kkal/mol dan momen dwikutub sebesar $3,911$ D. Dengan nilai ΔH_f homosalat sebesar $-138,80$ kkal/mol maka nilai ΔH_f ikatan hidrogen total yang terbentuk sebesar $-5,36$ kkal/mol.

Pengaruh interaksi ikatan hidrogen tersebut terhadap spektra transisi elektronik ditampilkan pada Tabel 2. Data pada Tabel 2, menunjukkan adanya pergeseran nilai λ_{maks} yang kecil antara masing-masing konfigurasi, pada molekul tunggal nilai λ_{maks} pada $207,96$ nm, pada konfigurasi dimer pada $207,78$ nm dan konfigurasi interaksi dengan molekul etanol pada $206,42$ nm.

Dari kajian spektra transisi secara teoritik terlihat bahwa antara molekul tunggal dengan konfigurasi interaksi dengan pelarut senyawa homosalat memiliki rentang spektra yang cukup lebar yang mencakup daerah UV-A, UV-B dan UV-C. Namun pada konfigurasi dimer terjadi transisi yang lebih banyak pada daerah UV-B dan UV-C. Penelitian ini relatif dapat mendukung hasil analisis oleh Tahir *et al.* (2007), yang telah mengkaji teknik pemodelan yang sama pada senyawa turunan asam amino menyerupai mycosporin (*Mycosporine's like Amino Acid* atau MAA). Senyawa ini telah diteliti sebagai suatu bahan alam dari spons atau mikroorganisme tingkat rendah di perairan yang memiliki kemampuan sebagai penyerap sinar UV (*UV absorber*).

Untuk penelitian lebih lanjut teknik yang sama dapat diaplikasikan pada jenis senyawa-senyawa lain yang memiliki kemampuan sebagai penyerap UV atau sunscreen. Untuk bidang pemodelan molekul, hal ini dapat memacu kajian lebih lanjut berupa pengembangan model analisis atau aplikasi teknik perhitungan kimia komputasi yang lebih maju.

KESIMPULAN

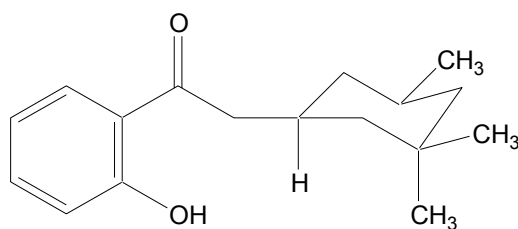
Secara eksperimen, senyawa homosalat merupakan senyawa tabir surya tipe UV-B dan UV-C, dan melalui perbaikan langkah pemodelan molekul senyawa homosalat berupa interaksi dalam bentuk dimer dan interaksi dengan ethanol dapat memberikan prediksi tipe aktivitas yang semakin mendekati tipe aktivitas secara eksperimen.

Secara kuantitatif, kajian interaksi ikatan hidrogen pada molekul senyawa berpotensi tabir surya baik sebagai dimer maupun interaksi dengan molekul etanol memberikan kecenderungan pergeseran merah namun nilai pergeseran tersebut tidak signifikan mendekati data eksperimen.

DAFTAR PUSTAKA

- 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.

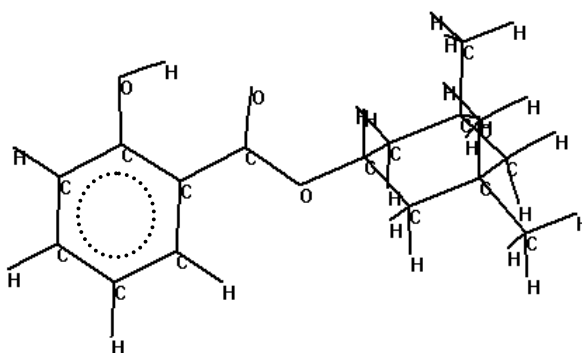
- Pop, E., and Brewster, M.E., 1997, Dimerization of Dexanabiol by Hydrogen Bonding Accounts for its Hydrophobic Character, *Int. J. Quant. Chem.*, 65, 1057 – 1064.
- Pradipta, M.F., 2000, *Studi Konformasi dan Ikatan Hidrogen Etil Metil Amonium-Dimetansulfonamidat dengan Metode MM dan Semiempirik*, Skripsi, FMIPA UGM, Yogyakarta.
- Rahmi dan Tahir, I., 2005, Analisis In Silico Senyawa Tabir Surya Turunan Oksibenzon dengan Pendekatan Perhitungan Orbital Molekul ZINDO/s, *Jurnal Farmasi Indonesia*, 2, 1, 1-11
- 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, *Indo. J Chem*, 2 53-59.
- Tahir, I., Wijaya, K., Subarni, T., dan Wahyuningsih, T.D., 2004, Analisis In Silico Senyawa Tabir Surya Alkil Sinamat Berdasarkan Perhitungan Transisi Elektronik dengan Metoda ZINDO/s, *Jurnal Farmasi Sains dan Komunitas*, II (3), 230-240
- [Tahir, I., Wijaya, K., Roto and Ahmadi, A., 2007, Analisis Spektra Transisi Elektronik Senyawa Tabir Surya Maa Gly Pada Konfigurasi Dimer Serta Konfigurasi Solut-Solven, *Berkala MIPA UGM*, 17 \(2\), 23-32](#)
- 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.



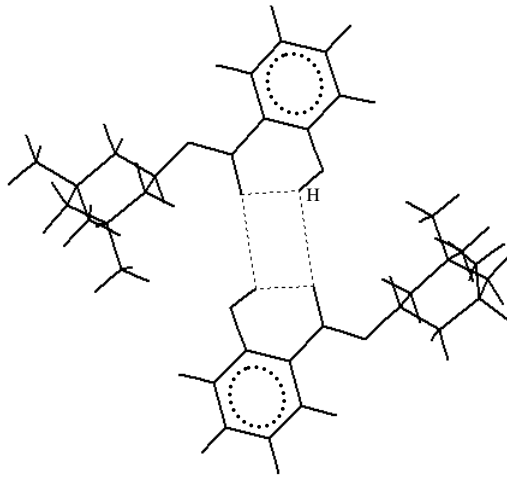
Homosalat

O

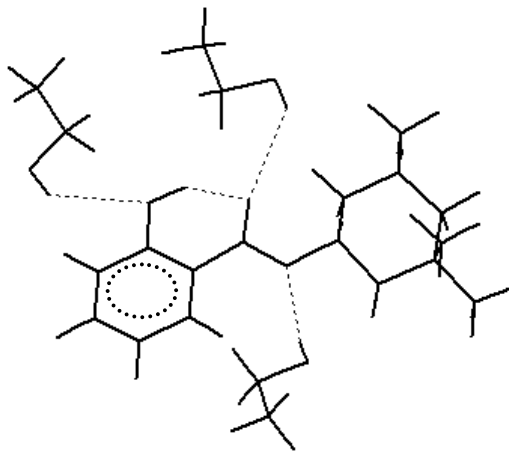
Gambar 1 Struktur senyawa homosalat



Gambar 2. Model struktur molekul senyawa homosalat



Gambar 3. Model konfigurasi dimer senyawa homosalat



Gambar 4. Model konfigurasi interaksi molekul homosalat-etanol

Tabel 1 Data spektra elektronik model senyawa homosalat tunggal hasil perhitungan metode semiempirik ZINDO/s

Panjang gelombang (nm)	Intensitas
207,96	0,884
210,68	0,074
243,33	0,177
294,00	0,092
381,59	0,003

Tabel 2. Data spektra transisi elektronik senyawa homosalat pada beberapa konfigurasi

Molekul homosalat tunggal		Molekul homosalat dimer		Molekul homosalat-etanol	
λ (nm)	Intensitas	λ (nm)	Intensitas	λ (nm)	Intensitas
207,96	0,884	206,92	0,076	206,42	0,877
210,68	0,074	207,78	2,041	208,04	0,181
		221,17	0,001		
		236,98	0,238		
243,33	0,177	240,02	0,120	241,37	0,194
		288,39	0,178		
294,00	0,092	292,94	0,065	293,17	0,097
371,59	0,001			322,78	0,001