

## ANALISIS SPEKTRA TRANSISI ELEKTRONIK SENYAWA TABIR SURYA AVOBENZON DAN OKSIBENZON MELALUI KAJIAN INTERAKSI DENGAN PELARUT ETANOL

Iqmal Tahir <sup>a,\*</sup>, Karna Wijaya <sup>a</sup>, dan Ari Ahmadi <sup>a</sup>

<sup>a)</sup> Pusat Kimia Komputasi Indonesia Austria, Jurusan Kimia,  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Sekip Utara, Jogjakarta 55281

\* Email : iqmal@ugm.ac.id

### INTISARI

Upaya peningkatan akurasi langkah pemodelan senyawa tabir surya avobenzon dan oksibenzon telah dilakukan dengan menggunakan model struktur yang melibatkan interaksi antara molekul senyawa dan molekul pelarut ethanol melalui ikatan hidrogen. Tujuan penelitian adalah untuk menghasilkan data aktivitas tabir surya prediksi yang lebih representatif 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 molekul dan pelarut melibatkan ikatan hidrogen yang menjadikan bentuk supramolekuler dari senyawa tabir surya dan molekul pelarut. Hasil kajian menunjukkan bahwa pada avobenzon dan oksibenzon masing-masing menunjukkan terjadi interaksi antar molekular yang kuat dan relatif stabil. Fenomena struktur ini akan memberikan pergeseran nilai  $\lambda_{maks}$  ke arah pergeseran merah namun relatif masih belum signifikan mendekati nilai hasil eksperimen.

Kata kunci: pemodelan molekul, senyawa tabir surya, supramolekul, ikatan hidrogen.

### ABSTRACT

Study to improve the accuracy of sunscreen modeling of avobenzon and oxybenzone have been done by proposing alternative model of supramolecule combining of the molecule and ethanol molecule as solvent. The purpose of the research was producing information of sunscreen activity that is more representative to experimental data. This study was performed by using semi empirical method PM3 followed by electronic transition spectral analysis that was calculated by ZINDO/s method. The result showed that both supramolecule of avobenzon and oxybenzone with ethanol respectively, would improving the red shift of the electronic transition spectra, although it was not significantly close to experimental data.

Keywords: molecular modeling, sunscreen compound, supramolecule, hydrogen bond.

---

### PENDAHULUAN

Senyawa tabir surya saat ini sangat bermanfaat bagi manusia karena digunakan dalam perlindungan kulit dengan kemampuan sebagai pelindung kulit dari bahaya radiasi sinar *ultra violet* (UV)

yang berasal dari paparan sinar matahari. Penelitian terbaru tentang tabir surya banyak 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). Riset senyawa tabir surya selain dilakukan secara eksperimen, ternyata dapat dilakukan dengan pendekatan pemodelan molekul. Riset eksperimen yang membutuhkan waktu dan biaya yang relatif lebih besar tentu akan memberikan hasil yang akurat. Riset senyawa tabir surya dengan pemodelan molekul berdasarkan perhitungan kimia komputasi diharapkan mengatasi kendala waktu dan biaya tersebut. Namun sejauh ini masih memberi kendala dari sisi tingkat akurasi yang dihasilkan dimana hal ini akan sangat tergantung pada pendekatan teoritik yang dilakukan (Leach, 2001).

Teknik pemodelan molekul cukup bervariasi antara lain melibatkan model molekul terisolasi atau model yang melibatkan interaksi antar molekular. Beberapa peneliti telah melakukan kajian pemodelan molekul senyawa tabir surya. Walters *et al.* (1997) telah melakukan pemodelan terhadap beberapa molekul tabir surya yaitu: oktil metoksisinamat, oksibenzon, oktil salisilat dan oktokrilen. Tahir *et al.* (2001) mengkaji secara intensif pemodelan senyawa turunan alkil sinamat berupa variasi substituen pada cincin fenil dan variasi rantai alkil. Kemudian hal serupa dilakukan kembali pada kasus senyawa alkil salisilat (Tahir *et al.*, 2001). 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. Penggunaan metoda semiempirik ZINDO diketahui cukup berhasil untuk mempelajari spektra transisi senyawa khromofor vialcein (Diaz *et al.*, 2002).

Tipe aktivitas tabir surya terkait dengan panjang gelombang serapan maksimum dan hal ini akan tergantung pada khromofor pada setiap senyawa tersebut (Sastrohamidjojo, 1991). Khromofor yang ada memungkinkan beberapa bentuk supra-molekul yang dimungkinkan terjadi akibat

interaksi antarmolekular. Senyawa berpotensi tabir surya sebagian besar merupakan senyawa organik yang memiliki gugus-gugus kromofor yang berfungsi untuk 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 perubahan struktur elektronik molekul. Penentuan panjang gelombang maksimum secara komputasional dapat dilakukan dengan penentuan spektra transisi elektronik senyawa. Selanjutnya untuk mengatasi perbedaan hasil dari langkah pemodelan dan eksperimen maka bentuk sistem yang dipelajari harus diperhitungkan.

Konfigurasi dimer senyawa berpotensi tabir surya telah dilakukan oleh Tahir *et al.* (2004) terhadap senyawa *mycosporine-like amino acid* (MAAs) dengan menggunakan metode semiempirik AM1 dan PM3 dan dilanjutkan dengan perhitungan spektra elektronik menggunakan ZINDO/s. 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. Aplikasi yang sama telah dikaji juga oleh Tahir *et al.* (2005) terhadap senyawa avobenzon dan oksibenzon walaupun hanya berhasil untuk mempelajari transisi elektronik dari bentuk dimer oksibenzon saja.

Model interaksi yang lain dalah dengan melibatkan interaksi molekul senyawa tabir surya dengan molekul pelarut. Analog dengan kajian ini adalah seperti yang dipublikasikan oleh Diaz *et al.* (2002) yang melakukan kajian terhadap interaksi senyawa

*violacein* dengan molekul etanol sebagai pelarut menggunakan metode semiempirik AM1 dan dilanjutkan dengan ZINDO/s. Dari penelitian tersebut didapatkan hasil bahwa efek etanol terhadap spektra elektronik *violacein* menyebabkan pergeseran biru terhadap panjang gelombang maksimum.

Pada penelitian ini dilakukan langkah koreksi interaksi molekul dan pelarut pada kajian senyawa avobenzon dan oksibenzon, sehingga diharapkan dapat memberikan hasil data yang mendekati kondisi eksperimen.

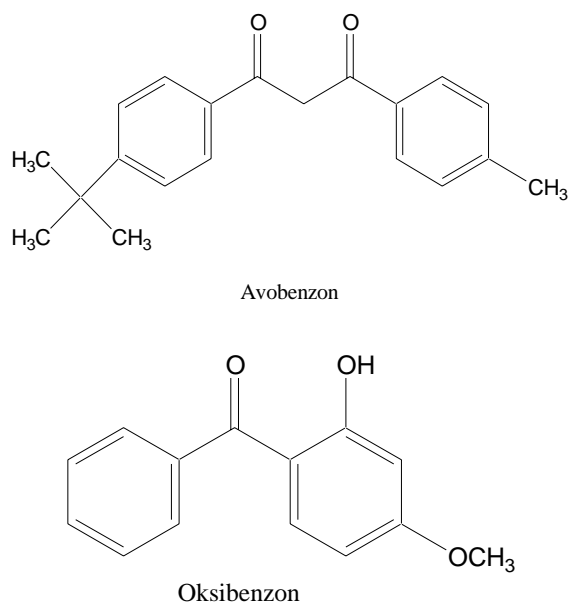
## METODE PENELITIAN

### Peralatan

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.

### Obyek penelitian

Pada penelitian ini model senyawa (Gambar 1) yang digunakan 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 tabir surya avobenzon dan oksibenzon.

## Prosedur Penelitian

### Optimasi geometri dengan metode PM3

Setiap senyawa berpotensi tabir surya yang menjadi obyek penelitian dibuat struktur 2D dengan paket perangkat lunak HyperChem™ versi 6.0 selanjutnya dilengkapi dengan atom hidrogen pada setiap atom untuk melengkapi struktur sebenarnya dan kemudian dibentuk menjadi struktur 3D (Anonim, 1996). Proses dilanjutkan dengan optimasi geometri berupa minimisasi energi 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 dengan algoritma Polak-Ribiere.

### Penentuan spektra elektronik dengan ZINDO/s

Struktur hasil optimasi geometri menghasilkan struktur senyawa yang stabil dan 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 berupa diagram spektra diskontinyu.

Analisis yang dilakukan berupa 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 molekul 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...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 supramolekul dari senyawa tabir surya dan pelarut. Dalam kajian ini ditentukan nilai entalpi pembentukan ( $\Delta H_f$ ) ikatan hidrogen melalui persamaan:

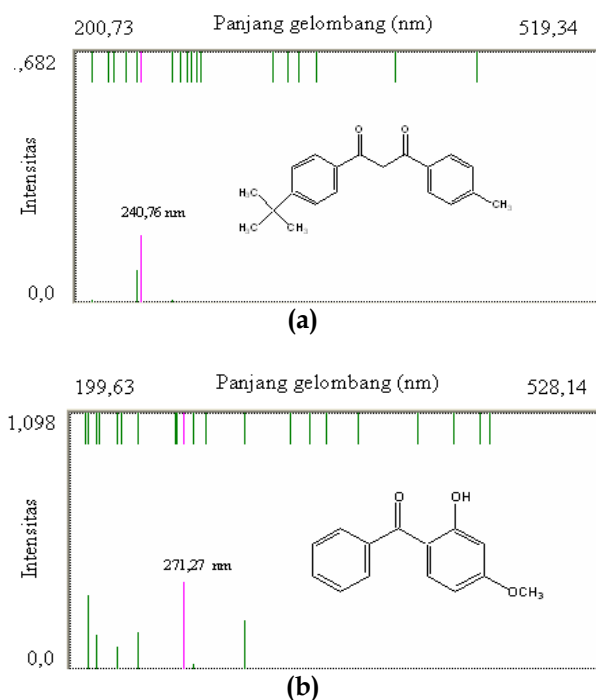
$$\Delta H_{f \text{ ikatan hidrogen}} =$$

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

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Langkah pertama pemodelan senyawa yang dikaji dilakukan pertama kali dalam keadaan molekul terisolasi. Langkah ini memberikan juga data spektra transisi elektronik untuk molekul tunggal dan terisolasi. Data spektra elektronik ini akan berbeda dengan format hasil secara

eksperimen. Spektra hasil eksperimen yang dilakukan dengan menggunakan spektrofotometer UV-Vis akan bersifat kontinyu, sedangkan spektra transisi elektronik dari perhitungan semiempirik yang memiliki sifat diskontinyu. Perbedaan tersebut 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 Gambar 2.



Gambar 2. Spektra transisi elektronik (a) avobenzen dan (b) oksibenzon.

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. Gambaran perbandingan spektra hasil pemodelan pada penelitian ini dan data hasil eksperimen disajikan pada Tabel 1.

**Tabel 1.** Data komparasi nilai  $\lambda_{maks}$  hasil optimasi geometri dan data eksperimen.

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

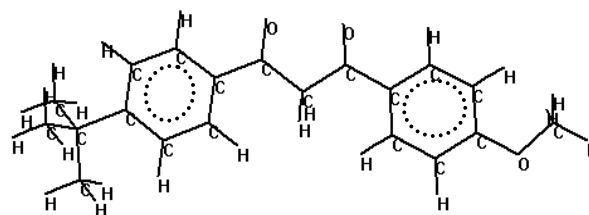
Data pada Tabel 1 menunjukkan nilai  $\lambda$  yang berbeda cukup signifikan dengan nilai  $\lambda$  yang diperoleh secara eksperimen. Hal ini dapat dikarenakan perbedaan kondisi sistem. Pada perhitungan secara kimia komputasi hanya mengukur spektra transisi elektronik suatu senyawa pada keadaan tunggal 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. Berdasarkan hal ini maka koreksi model molekul yang diteliti dilakukan dengan melibatkan interaksi dengan molekul pelarut.

Langkah 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

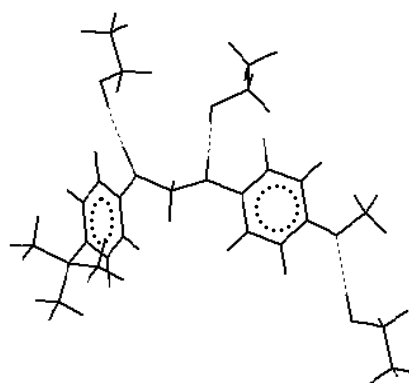
persyaratan jarak antar hidrogen dengan atom berpotensi negatif tidak lebih dari 3,2 Å dan sudut ikatan hidrogen yang terbentuk harus lebih besar dari 120° (Pop dan Brewster, 1997).

### Pemodelan Senyawa avobenzon

Struktur avobenzon sebagaimana terlihat pada Gambar 2 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<sup>δ-</sup> pada gugus karbonil dan metoksi dengan atom H<sup>δ+</sup> yang ada pada gugus metoksi. Bentuk interaksi dengan molekul etanol yang diperoleh ditunjukkan pada Gambar 3.



**Gambar 3.** Model struktur hasil pemodelan senyawa avobenzon.



**Gambar 4.** Model konfigurasi interaksi molekul avobenzon-etanol.

Interaksi senyawa avobenzon dengan molekul etanol terjadi pada gugus-gugus

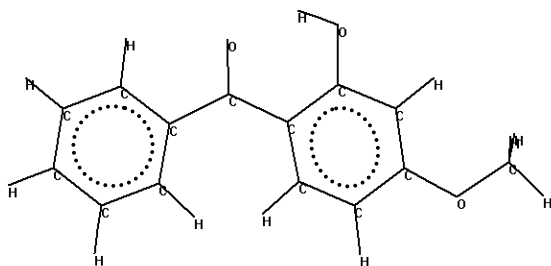
aktif sehingga ikatan hidrogen dapat terbentuk. Kajian ini menunjukkan perkiraan nilai energi total sebesar -125.928,4 kkal/mol dan nilai  $\Delta H_f$  sebesar -257,75 kkal/mol. Dengan nilai  $\Delta H_f$  avobenzon sebesar -82,96 kkal/mol dan nilai  $\Delta H_f$  etanol sebesar -56,97 kkal/mol maka nilai  $\Delta H_f$  ikatan hidrogen yang terbentuk sebesar -3,88 kkal/mol. Kajian terhadap pengaruh konfigurasi avobenzon-etanol menunjukkan terjadinya pergeseran spektra transisi elektronik molekul tunggal senyawa avobenzon seperti terlihat pada Tabel 2. Pergeseran nilai  $\lambda_{maks}$  dari 240,76 nm pada molekul tunggal menjadi 243,12 nm pada konfigurasi interaksi dengan molekul etanol.

**Tabel 2.** Spektra transisi elektronik molekul avobenzon.

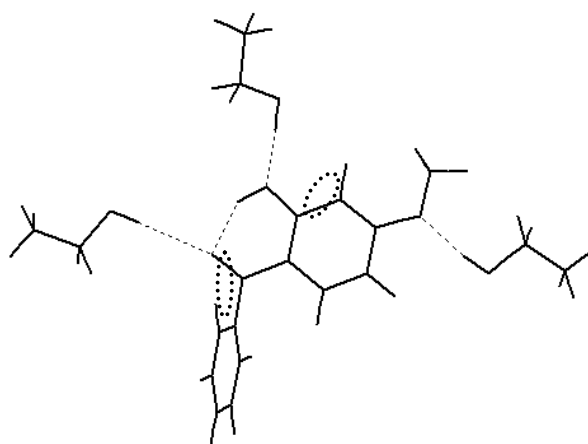
Molekul avobenzon tunggal		Molekul avobenzon-etanol	
$\lambda$ (nm)	intensitas	$\lambda$ (nm)	Intensitas
211,61	0,030	211,74	0,034
221,59	0,002	226,66	0,006
237,69	0,205	239,53	0,168
240,76	0,490	243,12	0,992
259,20	0,026	255,61	0,059
268,43	0,015	267,28	0,016
276,12	0,012	275,81	0,011

### Pemodelan Senyawa Oksibenzon

Oksibenzon merupakan senyawa tabir surya yang memiliki dua cincin fenil yang dihubungkan dengan sebuah gugus karbonil sebagaimana terlihat pada Gambar 5. Pada struktur oksibenzon terlihat memiliki gugus karbonil, hidroksi dan metoksi yang berada pada bidang datar yang berpotensi untuk membentuk interaksi ikatan hidrogen akibat interaksi dengan pelarut.



**Gambar 5.** Model struktur hasil pemodelan senyawa oksibenzon.



**Gambar 6.** Model konfigurasi interaksi molekul oksibenzon-etanol.

Pada Gambar 6 diperlihatkan keberadaan ikatan hidrogen yang membentuk interaksi molekul oksibenzon dengan molekul etanol. Dalam kondisi tersebut terjadi perubahan struktur geometri dimana terjadi rotasi seperti yang terjadi pada konfigurasi dimer namun dengan perubahan sudut torsi CCCO yang relatif rendah. Pada konfigurasi ini perubahan sudut torsi CCCO dari 0° menjadi 81,92°. Konfigurasi ini memiliki nilai energi total sebesar -105.964,5 kkal/mol, nilai  $\Delta H_f$  sebesar -245,41 kkal/mol dan nilai momen dwikutub sebesar 3,13 D. Dengan nilai  $\Delta H_f$  molekul tunggal etanol sebesar -63,04 kkal/mol dan  $\Delta H_f$  etanol sebesar -59,98 kkal/mol maka nilai  $\Delta H_f$  ikatan hidrogen total pada konfigurasi tersebut sebesar -11,43 kkal/mol.

Data kajian pengaruh konfigurasi interaksi ikatan hidrogen terhadap spektra transisi elektronik pada daerah UV ditampilkan pada Tabel 3 dengan perubahan nilai  $\lambda_{maks}$  dari 271,27 nm pada molekul tunggal menjadi 275,01 nm pada konfigurasi dimer dan 276,11 pada konfigurasi interaksi dengan molekul etanol.

Tabel 3. Data transisi elektronik daerah UV beberapa konfigurasi molekul oksibenzenon.

Molekul oksibenzenon tunggal		Molekul oksibenzenon- etanol	
$\lambda$ (nm)	intensitas	$\lambda$ (nm)	Intensitas
213,12	0,405	211,77	0,370
216,80	0,033	215,69	0,089
229,22	0,122	228,72	0,104
245,44	0,150	242,22	0,160
271,27	0,415	269,32	0,028
279,23	0,232	276,11	0,403
306,00	0,221	306,54	0,214

### Kajian Kualitatif Pengaruh Interaksi Molekul dan Etanol

Hasil perhitungan teoritik spektra transisi elektronik menggunakan teknik kimia komputasi semiempirik terhadap beberapa konfigurasi senyawa tabir surya menunjukkan bahwa telah terjadi pergeseran terhadap nilai transisi elektronik tiap konfigurasi tersebut. Data memperlihatkan terjadinya 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 dan molekul pelarut mengakibatkan perubahan terhadap transisi elektronik. Jumlah transisi elektronik yang dihasilkan akan lebih banyak jika dibandingkan pada spektra transisi untuk molekul tunggal. Spektra transisi elektronik konfigurasi tersebut menunjukkan terdapat transisi-transisi baru yang diakibatkan karena perubahan orbital elektronik yang terjadi.

### KESIMPULAN

1. Kajian teoritik mengenai spektra transisi molekul senyawa berpotensi avobenzenon dan oksibenzenon dengan optimasi geometri menggunakan metode semiempirik PM3 dan dilanjutkan dengan perhitungan *single-point* metode ZINDO/s masih memiliki perbedaan nilai  $\lambda_{maks}$  secara signifikan dengan data eksperimen.
2. Konfigurasi struktur supramolekul yang terbentuk dari masing-masing senyawa avobenzenon dan oksibenzenon dengan molekul etanol sebagai pelarut 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

1. Anonim, 1996, *Hyperchem™ Release 5 for Windows : Reference Manual*, Hypercube Inc., Ontario.
2. Bures, M., and Bezus, J., 1994, Study of Hydrogen Bonding in Carboxylic Acids by The MNDO Methods, *Czechk Chem Com*, 59,6,1251-1260.
3. Damayanti, R., 2003, *Pemodelan Molekul Senyawa MAAS-glisin Sebagai Penyerap Sinar UV*, Skripsi, FMIPA UGM, Jogjakarta.
4. 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,
5. 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.
6. Leach, A.R., 2001, *Molecular Modeling: Principle and Application*, Pearson Education Limited, Harlow.
7. 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.
8. Pradipta, M.F., 2000, *Studi Konformasi dan Ikatan Hidrogen Etil Metil Amonium-Dimetansulfonamidat dengan Metode MM dan Semiempirik*, Skripsi, FMIPA UGM, Yogyakarta.

9. Sastrohamidjojo, H., 1991, *Spektroskopi*, Liberty, Yogyakarta.
10. Tahir, I., Siswandari, A., Setiaji, B., Raharjo, T.J., Wahyuningsih, T.D., dan Noegrohati, S., 2001, Design of Alkyl Cynamic as Sunscreen Substance Based on Electronic Spectra Calculation, *Jurnal Nasional Kimia Fisik*, III, 2, 33-37.
11. 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.
12. 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.
13. Tahir, I., Wijaya, K., Wahyuningsih, T.D., dan Ahmadi, A., 2005, *Analisis Spektra Transisi Elektronik Beberapa Senyawa Tabir Surya Akibat Pengaruh Interaksi Ikatan Hidrogen Pada Konfigurasi Dimer*, Seminar Nasional Dies ke-50 FMIPA UGM, Yogyakarta 17 September 2005.
14. 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.