

MODELING OF ALKYL SALICYLATE COMPOUNDS AS UV ABSORBER BASED ON ELECTRONIC TRANSITION BY USING SEMIEMPIRICAL QUANTUM MECHANICS ZINDO/s CALCULATION

Pemodelan Senyawa Alkil Salisilat sebagai Penyerap Sinar UV Berdasarkan Pendekatan Transisi Elektronik Hasil Perhitungan Mekanika Kuantum Semiempirik ZINDO/s.

Iqmal Tahir, Karna Wijaya, Titik Subarni
Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry
Gadjah Mada University, Yogyakarta

ABSTRACT

Modeling of several alkyl salicylates based on electronic transition by using semiempirical mechanical quantum ZINDO/s calculation has been done. Object of these research were assumed only alkyl salicylates of C₄ (butyl) until C₈ (octyl) homologue with 4-7 example structures of each homologue. All of the computation have been performed using quantum chemistry – package software Hyperchem 6.0. The research covered about drawing each of the structure, geometry optimization using semiempirical AM1 algorithm and followed with single point calculation using semiempirical ZINDO/s technique. ZINDO/s calculations used a defined criteria that is singly excited – Configuration Interaction (CI), gap of HOMO-LUMO energy transition was 2 and degeneracy level was 3. Analysis of the theoretical spectra was focused in the UV-B (290-320 nm) and UV-C (200-290 nm) area.

The result showed that modeling of the compound can be used for predicting the type of UV protection activity depending with the electronic transition in the UV area. Modification of the alkyl homologue relatively did not change the value of wavelength absorption to indicate the UV protection activity. Alkyl salicylate compounds were predicted as UV-C sunscreen or relatively the compounds have protection effect for UV-C.

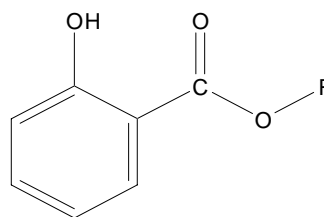
Keywords: *alkyl salicylate, sunscreen, semiempirical methods*

PENDAHULUAN

Riset pengembangan produk-produk senyawa tabir surya saat ini banyak dilakukan dalam rangka menemukan senyawa baru berkhasiat baik dan tidak menyebabkan efek samping pada pemakai. Senyawa tabir surya adalah senyawa yang dapat melindungi kulit dari pengaruh sinar ultra violet (UV) yang dipancarkan dari matahari. Mekanisme perlindungan sinar UV dari suatu senyawa tabir surya adalah berupa penyerapan energi sinar UV yang digunakan untuk eksitasi keadaan elektronik senyawa [1]. Salah satu contoh senyawa tabir surya yang cukup populer adalah *p*-metoksi oktil sinamat dan oktil salisilat [2].

Berdasarkan struktur kimianya, ada dua bagian pada senyawa *p*-

metoksi oktil sinamat atau oktil salisilat maka terdapat bagian rantai alkil dan bagian rantai benzil. Senyawa turunan kedua senyawa tersebut dapat diperoleh dengan melakukan modifikasi pada salah satu bagian struktur atau kombinasi pada kedua bagian. Model senyawa-senyawa turunan itu dapat dilakukan dengan menggunakan teknik kimia komputasi. Struktur senyawa salisilat disajikan pada gambar 1.



Gambar 1. Struktur alkil salisilat
(R = gugus alkil)

Serapan cahaya oleh molekul dalam daerah spektrum ultraviolet dan terlihat tergantung pada struktur elektronik dari molekul. Spektra ultraviolet dan terlihat dari senyawa-senyawa organik berkaitan erat dengan transisi-transisi di antara tingkatan tenaga elektronik [3].

Desain senyawa tabir surya telah dilakukan dengan beberapa cara antara lain dengan eksperimen langsung [4] dan dengan memanfaatkan aplikasi riset kimia komputasi [5,6]. Desain senyawa tabir surya dengan kimia komputasi memiliki keunggulan yang lebih dibanding dengan eksperimen langsung. Biaya dan waktu yang dikeluarkan untuk proses desain suatu senyawa tabir surya dengan menggunakan kimia komputasi relatif lebih sedikit [7,8]. Selain itu dengan kimia komputasi dapat diperoleh lebih banyak model senyawa baru dengan biaya relatif murah dan mudah dilakukan.

Penggunaan metoda kimia komputasi untuk riset senyawa tabir surya dapat dilakukan dengan pendekatan secara kualitatif dan kuantitatif [5]. Riset secara kualitatif digunakan dengan mengkaji model-model struktur senyawa kimia pada aspek perhitungan spektra transisi elektronik. Kajian dilakukan dengan mempelajari daerah transisi yang mungkin terjadi khususnya pada daerah UV-B dan UV-C yakni daerah sinar UV yang relatif berbahaya bagi kulit manusia [9]. Hasil yang diperoleh berupa model desain senyawa-senyawa yang diprediksikan memiliki aktivitas sebagai senyawa tabir surya dengan tipe tertentu (tergantung pada daerah panjang gelombang serapannya).

Selain secara kualitatif, riset tabir surya juga dapat dilakukan dengan pendekatan kuantitatif yakni menggunakan analisis *Quantitative Structure Activity Relationship* (QSAR). Desain senyawa tabir surya turunan isoamil sinamat baru dengan menentukan hubungan kuantitatif antara struktur elektronik senyawa dengan aktivitas tabir surya menggunakan pendekatan analisis QSAR untuk

turunan isoamil sinamat tersubstitusi berdasar hubungan multivariat [6].

Untuk perhitungan spektra transisi, metoda kimia yang digunakan adalah mekanika kuantum baik teknik *ab initio* maupun semi empirik. Teknik perhitungan semiempirik lebih disukai untuk penelitian yang melibatkan banyak struktur yang harus dihitung. Hal itu karena konsumsi perhitungan lebih sederhana dan relatif cepat dari teknik *ab initio*. Metoda semi empirik yang dapat digunakan adalah metoda ZINDO dan turunannya.

Penerapan metoda kimia komputasi untuk digunakan pada riset pengembangan senyawa tabir surya cukup banyak. Pemodelan senyawa tabir surya telah dilakukan oleh Walters, dkk [5]. Riset serupa telah dilakukan oleh penulis [10] menggunakan perhitungan orbital molekul semiempirik ZINDO untuk mengkaji tipe aktivitas dari berbagai senyawa turunan isoamil sinamat. Hasil perhitungan menunjukkan kesesuaian tipe aktivitas senyawa-senyawa tabir surya turunan alkil sinamat dengan variasi gugus alkil dan gugus pensubstitusi pada cincin benzena.

Aplikasi metoda semi empirik ZINDO/s juga telah dimanfaatkan oleh penelitian sebelumnya. Mudhab [11] telah menggunakan metoda tersebut untuk mempelajari aspek geometri dan spektra transisi dari senyawa kompleks Co(II)-fenantrolin dan Co(II)-bipiridin. Untuk itu metoda ZINDO/s dapat dipilih untuk mempelajari desain dan model senyawa-senyawa baru turunan sinamat dan salisilat.

Tujuan penelitian ini adalah dapat melakukan pemodelan senyawa baru turunan alkil salisilat dengan menggunakan pendekatan kimia komputasi berupa perhitungan spektra transisi yang selanjutnya digunakan untuk mempelajari tipe aktivitas penyerapan sinar UV oleh senyawa.

METODOLOGI

Materi Penelitian

Penelitian komputasi ini menggunakan struktur-struktur senyawa

alkil salisilat dengan jenis alkil merujuk pada bahan alkil asetat yang tersedia di katalog bahan kimia komersial. Jenis alkil dibatasi untuk homolog C₄ (butil) sampai C₈ (oktil).

Peralatan

Fasilitas-fasilitas yang digunakan dalam penelitian ini adalah:

- Perangkat keras berupa komputer Pentium II 400 MHz dengan RAM 64 MB
- Perangkat lunak kimia komputasi yakni Hyperchem for Window versi 6.0 (Hypercube)

Prosedur Kerja

Optimasi geometri

Untuk setiap senyawa yang digunakan sebagai bahan penelitian, dibuat struktur secara 2D dengan paket program Hyperchem [12]. Selanjutnya dilengkapi dengan atom hidrogen pada setiap atom untuk melengkapi struktur sebenarnya dan kemudian dibentuk menjadi struktur 3D. Proses dilanjutkan dengan optimisasi geometri struktur berupa minimisasi energi struktur untuk memperoleh konformasi struktur molekul terstabil.

Metoda yang digunakan adalah metoda semiempirik AM1 (Austin Model 1) dan batas konvergensi ditentukan setelah mencapai batas gradien perubahan energi per perubahan posisi sebesar 0.001 mencapai batas gradien sekawan. Setelah diperoleh struktur terstabil, dilakukan perhitungan single point energi untuk pencatatan data perhitungan.

Penentuan spektrum

Struktur hasil optimasi dengan metoda AM1 diteruskan dengan perhitungan single point menggunakan metode semiempirik ZINDO/S untuk menghasilkan data spektra transisi elektronik. Pada perhitungan ini, kriteria yang dipenuhi untuk metoda interaksi konfigurasi adalah 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.

Data hasil perhitungan berupa spektra diskontinyu untuk daerah panjang gelombang UV-visible dan data rekaman perhitungan. Data ini selanjutnya digunakan untuk memprediksikan tipe aktifitas senyawa tabir surya secara teoritik.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Kajian terhadap senyawa alkil salisilat

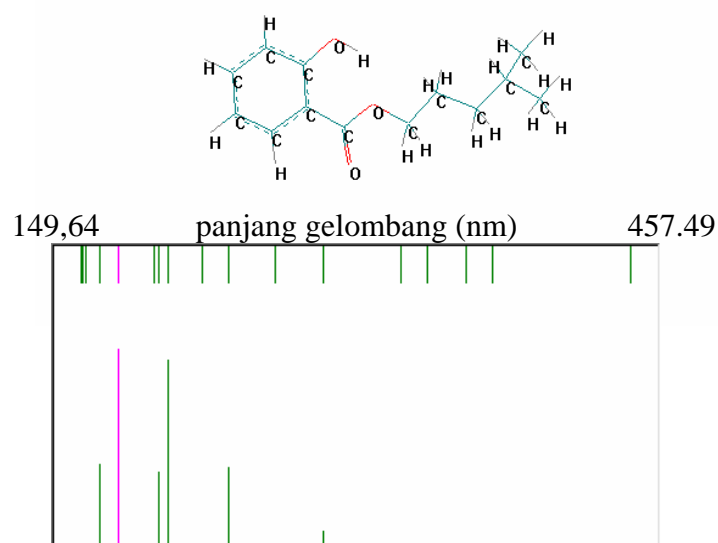
Kajian pada senyawa alkil salisilat dilakukan dengan memodifikasi substitusi rantai alkil. Kajian yang dilakukan adalah pada pengaruh panjang rantai alkil yang disubstitusikan dan pengaruh perubahan bentuk isomer untuk setiap homolog.

Perubahan substituen pada bagian rantai alkil meliputi perubahan panjang rantai alkil serta perubahan bentuk isomer rantai alkil. Analisis dilakukan dengan menggunakan rantai alkil homolog C₄(butil) sampai C₈(oktil). Senyawa yang dianalisis dikelompokkan dan diberikan kode seperti yang ditunjukkan pada tabel 1. Dari setiap homolog yang mungkin terjadi, tidak semua dilakukan sebagai contoh homolog heksil dan homolog alkil masing-masing hanya 4 homolog saja.

Untuk senyawa turunan salisilat dengan variasi substituen pada daerah benzil tidak dilakukan. Hal ini karena pertimbangan praktis bahwa tingkat kesulitan dalam sintesis senyawa tersebut relatif semakin kompleks. Adanya gugus OH pada daerah benzil dapat merumitkan prosedur sintesis senyawa turunan alkil salisilat tersubstitusi yang diinginkan.

Tabel 1 Beberapa senyawa turunan alkil salisilat

No	Senyawa	Rantai alkil	Kode
Homolog butil salisilat			
1	n-Butil salisilat	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_3\text{-}$	4-1
2	Isobutil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_2\text{-CH}_2\text{-}$	4-2
3	1-Metil propil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)H-}$	4-3
4	Tersier butil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_3\text{-}$	4-4
Homolog amil salisilat			
5	n-Amil salisilat	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_4\text{-}$	5-5
6	2-Metil amil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)H-CH}_2\text{-}$	5-6
7	Isoamil salisilat	$\text{CH}_3\text{-C(CH}_3\text{)H-(CH}_2\text{)}_2\text{-}$	5-7
8	1-Metil butil salisilat	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_2\text{-C(CH}_3\text{)-}$	5-8
9	1,2-Dimetil propil salisilat	$\text{CH}_3\text{-C(CH}_3\text{)H-C(CH}_3\text{)H-}$	5-9
10	1 Etil propil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_2\text{-CH}_3\text{)-}$	5-10
11	2-Dimetil propil salisilat	$\text{CH}_3\text{-C(CH}_3\text{)}_2\text{-CH}_2\text{-}$	5-11
12	1-Dimetil propil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)}_2\text{-}$	5-12
Homolog heksil salisilat			
13	n-Heksil salisilat	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_5\text{-}$	6-13
14	4-metil amil salisilat	$\text{CH}_3\text{-C(CH}_3\text{)H-(CH}_2\text{)}_3\text{-}$	6-14
15	isoamil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)H-(CH}_2\text{)}_2\text{-}$	6-15
16	3,3-dimetil butil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_3\text{-(CH}_2\text{)}_2\text{-}$	6-16
Homolog heptil			
17	n-Heptil salisilat	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_6\text{-}$	7-17
18	5-metil heksil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_2\text{H-(CH}_2\text{)}_4\text{-}$	7-18
19	4,4-dimetil amil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_3\text{-(CH}_2\text{)}_3\text{-}$	7-19
20	3,4-dimetil amil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_2\text{-C(CH}_2\text{)H-(CH}_2\text{)}_2\text{-}$	7-20
Homolog oktil			
21	n-Oktil salisilat	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_7\text{-}$	8-21
22	4,5-dimetil heksil salisilat	$\text{C(CH}_3\text{)}_2\text{H-C(CH}_3\text{)H-(CH}_2\text{)}_3\text{-}$	8-22
23	3,4-dimetil heksil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)H-C(CH}_3\text{)H-(CH}_2\text{)}_2\text{-}$	8-23
24	4,4-dimetil heksil salisilat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(CH}_3\text{)}_2\text{-(CH}_2\text{)}_3\text{-}$	8-24



Gambar 2. Struktur dan spektra hasil perhitungan untuk senyawa butil salisilat

Perbedaan panjang gelombang yang ada dari analisis dengan komputasi kimia dan eksperimen laboratorium telah dilakukan oleh penelitian sebelumnya [5,10]. Selisih nilai tersebut dapat dijelaskan karena dalam kimia komputasi senyawa dalam keadaan murni, sedangkan dari hasil eksperimen senyawa yang dianalisis memiliki kemurnian yang relatif rendah. Pelarut yang digunakan juga memiliki pengaruh terhadap serapan terukur. Dalam pelarut-pelarut yang lebih polar serapan $\pi \rightarrow \pi^*$ bergeser ke λ yang panjang, $n \rightarrow \pi^*$ bergeser ke panjang gelombang yang lebih pendek.

Data yang dihasilkan dari perhitungan kimia komputasi berupa data panjang gelombang dengan intensitas yang relatif lebih tinggi dari yang dihasilkan dari perhitungan yang berada pada daerah UV. Contoh spektra hasil perhitungan ditunjukkan pada gambar 2 untuk senyawa butil salisilat. Spektra yang dihasilkan adalah spektra diskontinyu, berupa pita-pita diskret yang menunjukkan intensitas serapan sinar akibat terjadinya eksitasi elektron.

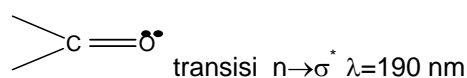
Pada gambar 2 terlihat pita-pita diskret yang menunjukkan semua transisi elektronik. Spektra bagian atas merepresentasikan semua transisi elektronik yang terjadi tanpa menunjukkan nilai energi, sedangkan bagian bawah merepresentasikan transisi-transisi dengan intensitas yang relatif besar atau menunjukkan transisi utama.

Spektra diskontinyu ini terjadi karena dalam perhitungan kimia komputasi senyawa diasumsikan:

- Senyawa dalam keadaan gas murni, sehingga tidak ada pengaruh dari senyawa lain.
- Transisi elektronik berlaku secara terkuantumkan yakni dari satu lintasan tertentu ke lintasan yang lainnya.

Dari hasil analisis struktur kimia senyawa butil salisilat, terlihat

ketersediaan beberapa gugus-gugus kromofor tak terkonjugasi sederhana. Masing-masing memiliki jenis transisi elektron dan panjang gelombang serapan yang berbeda-beda. Kromofor-kromofor tak terkonjugasi tersebut adalah:



Selain gugus kromofor tak terkonjugasi sederhana tersebut, masih terdapat beberapa gugus auxokrom, yaitu gugus jenuh yang bila terikat pada kromofor mengubah panjang gelombang dan intensitas serapan maksimum. Dalam senyawa ini yang termasuk gugus auxokrom adalah gugus hidroksi (-OH).

Data hasil perhitungan kimia komputasi untuk kajian terhadap perubahan bentuk isomer rantai alkil pensubstitusi pada alkil salisilat ditunjukkan pada tabel 2.

Perubahan bentuk isomer untuk setiap homolog alkil yang dilakukan pada rantai alkil pensubstitusi relatif tidak menyebabkan pergeseran panjang gelombang serapan secara signifikan. Senyawa masih ada dalam daerah panjang gelombang serapan yang relatif hampir sama dengan intensitas yang . Sehingga aktivitas senyawa tabir surya alkil salisilat tidak mengalami perubahan. Senyawa alkil salisilat memiliki kemampuan sebagai aktivitas sebagai senyawa tabir surya UV-B walaupun intensitasnya relatif rendah. Aktivitas yang dominan dari senyawa alkil salisilat yang dominan adalah sebagai senyawa tabir surya UV-C.

Tabel 2 Rekapitulasi data serapan senyawa turunan alkil salisilat pada daerah UV

No	Senyawa	Daerah UV-B		Daerah UV-C	
		λ (nm)	intensitas	λ (nm)	intensitas
Homolog butil salisilat					
1	4-1	328,6	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7028
2	4-2	323,6	0,0006	291,8 205,3	0,0903 0,6468
3	4-3	325,3	0,0014	287,0 207,6	0,0708 0,7180
4	4-4	325,4	0,0003	291,6 205,5	0,6506 0,0900
Homolog amil salisilat					
5	5-5	328,6	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7040
6	5-6	311,6	0,0019	278,1 204,0	0,0127 0,4901
7	5-7	315,7	0,0081	282,7 204,0	0,0335 0,4901
8	5-8	316,4	0,0074	288,2 204,1	0,0329 0,4873
9	5-9	326,5	0,0016	272,2 230,3	0,0170 0,4578
10	5-10	328,1	0,0005	272,4 230,4	0,0174 0,4625
11	5-11	327,4	0,0003	288,3 208,2	0,0774 0,7014
12	5-12	328,6	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7048
Homolog heksil salisilat					
13	6-13	328,5	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7052
14	6-14	326,5	0,0013	287,3 207,7	0,0722 0,7103
15	6-15	323,4	0,0006	291,8 205,2	0,0901 0,6344
16	6-16	327,5	0,0003	288,2 208,2	0,0772 0,7015
Homolog heptil					
17	7-17	328,5	0,0003	288,2 208,2	0,0769 0,7056
18	7-18	326,6	0,0013	287,3 207,7	0,0722 0,7110
19	7-19	325,9	0,0003	288,2 208,2	0,0769 0,7042
20	7-20	323,5	0,0013	287,3 207,7	0,0722 0,7096
Homolog oktil					
21	8-21	323,5	0,0006	291,8 205,2	0,0902 0,6395
22	8-22	326,4	0,0012	287,3 207,7	0,0723 0,7111
23	8-23	325,4	0,0013	287,3 207,7	0,0723 0,7104
24	8-24	326,0	0,0013	287,2 207,7	0,0721 0,7121

Tabel 3 Pengaruh panjang rantai alkil terhadap panjang gelombang serapan

No	Kode	Daerah UV-B		Daerah UV-C	
		λ (nm)	intensitas	λ (nm)	intensitas
1	4-1	328,6	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7028
2	5-5	328,6	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7040
3	6-13	328,5	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7052
4	7-17	328,5	0,0003	288,2 208,2	0,0769 0,7056
5	8-21	323,5	0,0006	291,8 205,2	0,0902 0,6395

Tabel 4 Pengaruh bentuk isomer rantai butil terhadap panjang gelombang serapan

No	Kode	Daerah UV-B		Daerah UV-C	
		λ (nm)	intensitas	λ (nm)	intensitas
1	4-1	328,6	0,0003	288,2 208,2	0,0770 0,7028
2	4-2	323,6	0,0006	291,8 205,3	0,0903 0,6468
3	4-3	325,3	0,0014	287,0 207,6	0,0708 0,7180
4	4-4	325,4	0,0003	291,6 205,5	0,6506 0,0900

Dari hasil kajian yang ditunjukkan dalam tabel 2 dapat diketahui bahwa pergeseran panjang gelombang serapan dan intensitasnya relatif tidak dipengaruhi oleh perubahan bentuk isomer senyawa. Dari hasil kajian yang ditunjukkan pada tabel diatas terlihat bahwa modifikasi panjang rantai alkil pada senyawa alkil salisilat juga tidak berpengaruh pada pergeseran panjang gelombang serapan yang dimiliki senyawa. Hal itu seperti juga yang terjadi pada senyawa turunan sinamat [10].

Pengaruh panjang rantai alkil yang disubstitusikan ditunjukkan pada tabel 3. Ukuran rantai alkil relatif tidak terlalu berpengaruh baik pada pergeseran panjang gelombang maupun intensitasnya. Dengan demikian tipe perlindungan sinar UV juga tidak terlalu dipengaruhi oleh panjang rantai alkil dari senyawa salisilat.

Selanjutnya untuk kajian terhadap perubahan bentuk isomer rantai alkil pensubstitusi pada alkil salisilat juga relatif tidak terlalu berpengaruh baik

pada pergeseran panjang gelombang maupun intensitasnya. Contohnya adalah untuk homolog rantai butil seperti yang ditunjukkan pada tabel 4 berikut. Senyawa masih ada dalam daerah panjang gelombang serapan yang relatif hampir sama, sehingga aktivitas senyawa tabir surya alkil salisilat tidak mengalami perubahan. Secara umum, aktivitas yang dominan dari senyawa alkil salisilat yang dominan adalah sebagai senyawa tabir surya UV-C.

Fakta bahwa panjang gelombang serapan maksimum yang dihasilkan relatif tidak terpengaruh baik oleh pengaruh penggantian bentuk gugus alkil mulai dari rantai lurus homolog butil (C_4) sampai oktil (C_8) maupun akibat perbedaan bentuk percabangan pada rantai alkil dapat difahami karena gugus-gugus alkil tersebut tidak mengandung adanya gugus kromofor.

Pergeseran panjang gelombang pada senyawa tabir surya dapat diusahakan dengan menggunakan substitusi rantai alkil yang mengandung gugus kromofor, yaitu rantai alkil yang

mengandung ikatan rangkap dua, maupun ikatan rangkap tiga.

Pergeseran panjang gelombang diduga akan terjadi secara lebih signifikan jika digunakan rantai alkil yang mengandung gugus kromofor, yaitu dengan menggunakan rantai alkil yang mengandung ikatan rangkap dua maupun ikatan rangkap tiga. Adanya ikatan rangkap tersebut dapat menggeser daerah panjang gelombang serapan maksimum. Jumlah, jenis, dan posisi ikatan rangkap ini diduga dapat mempengaruhi daerah panjang gelombang serapan maksimum tersebut. Jumlah ikatan rangkap secara kuantitas meningkatkan pergeseran panjang gelombang yang terjadi. Demikian juga pergeseran panjang gelombang maksimum yang terjadi akibat ikatan rangkap dua dan ikatan rangkap tiga juga berbeda. Faktor posisi ikatan rangkap berpengaruh terhadap kestabilan struktur molekul dan dapat mengakibatkan terjadinya fenomena senyawa dengan ikatan rangkap terkonjugasi, hal ini akan berakibat pada terjadinya pergeseran panjang gelombang maksimum.

KESIMPULAN

1. Desain senyawa tabir surya dapat dilakukan dengan menggunakan metode kimia komputasi melalui pendekatan perhitungan transisi energi elektronik hasil perhitungan orbital semiempirik molekul metode ZINDO/s, yaitu berdasarkan analisis transisi elektronik senyawa yang memberikan intensitas relatif tinggi pada daerah panjang gelombang UV-B dan UV-C.
2. Senyawa turunan alkil salisilat dengan rantai butil, amil, heksil, heptil dan oktil merupakan senyawa penyerap sinar UV-C atau diduga tergolong sebagai senyawa tabir surya dengan tipe UV-C.
3. Substitusi alkil pada senyawa alkil salisilat relatif tidak memberikan perubahan pergeseran panjang gelombang serapan dari senyawa.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Proyek QUE Jurusan Kimia yang telah memberikan dana penelitian melalui Project Grant 2000/2001.

DAFTAR PUSTAKA

1. Kimbrough, D.R., 1997, *The Photochemistry of Sunscreens*, *J.Chem.Ed.*, 74, 1, 5-53
2. Website : <http://www.msv.edu/~aslocum/sun/sunscreen.htm>, diakses tanggal 20 Juni 2002
3. Sastrohamidjojo, H, 1991, *Spektroskopi*, Edisi kedua, Liberty, Yogyakarta
4. Finnen, M.J., 1987, *Skin Metabolism by Oxydation and Conjugation*, *J. Pharmacol. Skin*, 72, 4, 69-88
5. Walters, C., Keeney. A., Wigal, C.T., Johnston. C.R., Cornelius. R.D., 1997, *The Spectrophotometry Analysis and Modelling of Sunscreens*. *J. Chem.Ed.*. 74.1. 99-102
6. Siswandari, A, 2001, *Desain Senyawa Tabir Surya Turunan Isoamil Sinamat Menggunakan Pendekatan QSAR*, Skripsi, FMIPA UGM, Yogyakarta
7. Grant, G.H.dan Richards, W.G., 1995, *Computational Chemistry*, Oxford Science Publication, Oxford University Press. Oxford
8. Leach, A.R., 1996, *Molecular Modelling : Principles and Application*, Addison Wesley Longman, Southampton University, London
9. Davis, M.R., dan Quigley, M.N., 1995, *J. Chem. Educ.*, 72, 279-281
10. Tahir, I., Siswandari, I., Raharjo, T.J., Wahyuningsih, T.D., Noegrohati, S., 2000, *Desain Senyawa Tabir Surya Turunan Alkil Sinamat Berdasarkan Pendekatan Kimia Komputasi*, Makalah Seminar Kimia Fisik I, Malang

11. Mudhab, S, 2002, *Studi Terhadap Kompleks Kobalt-Fenantrolin dan Kobalt-Bipiridin Suatu Pendekatan Eksperimen dan Kimia Komputasi*, Tesis Program Pascasarjana UGM, Yogyakarta
12. Anonim, 1992, *Hyperchem™ Release 3 for Windows : Manual*, Autodesk Inc., Tulsa