

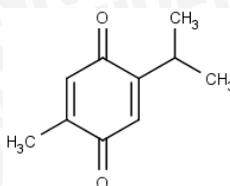
BAB 2

TUNJAUAN PUSTAKA

2.1 Timokuinon

Timokuinon merupakan bahan aktif yang diisolasi dari tanaman *Nigella sativa* dan telah diteliti untuk aktivitas anti-oksidan, anti-inflamasi dan antikanker baik model *in vitro* maupun *in vivo* sejak ekstraksi pertama di tahun 1960-an. Efek anti-oksidan atau anti-inflamasi telah dilaporkan pada berbagai model penyakit, termasuk ensefalomielitis, diabetes, asma dan karsinogenesis. Selain itu, timokuinon dapat bertindak sebagai anti radikal bebas dan radikal superoksida, serta mempertahankan aktivitas berbagai enzim anti-oksidan seperti katalase, glutathion peroksidase dan glutathion-S-transferase. Efek antikanker dari timokuinon dimediasi melalui berbagai bentuk aktivitas termasuk antiproliferasi, induksi apoptosis, penghentian siklus sel, pembentukan ROS dan antimetastasis atau antiangiogenesis. Selain itu, kuinon ini ditemukan menunjukkan aktivitas antikanker melalui modulasi beberapa target molekul, termasuk p53, p73, PTEN, STAT3, PPAR- γ , aktivasi caspase dan pembentukan ROS (Woo *et al.*, 2012).

Timokuinon yang memiliki sinonim 2-isopropil-5-metil-1,4-benzokuinon adalah senyawa aktif dengan berbagai efek farmakologi yang dimilikinya (Alkhafy *et al.*, 2015).



Gambar 2.1 Struktur Senyawa Timokuinon

Data tentang sifat fisika dan kimia senyawa Timokuinon masih terbatas. Timokuinon berupa padatan berwarna kekuning-kuningan yang memiliki titik nyala sebesar 103°C; titik lebur 44-47°C; dan titik didih 230-232°C. Senyawa ini memiliki rumus molekul $C_{10}H_{12}O_2$ dan berat molekul 164,2 g/mol (Fisher Scientific, 2015). Berdasarkan data kelarutan Timokuinon, didapatkan hasil bahwa timokuinon dapat larut ~0,5 mg/ml dalam 1 : 1 EtOH : PBS (pH 7,2). Senyawa ini dalam pelarut EtOH dan DMF larut sebanyak ~16 mg/ml, dan dalam pelarut DMSO larut sebanyak ~14 mg/ml (Cayman Clinical, 2014).

Belum ada literatur yang memberikan data tentang koefisien partisi dan kelarutan dalam air dari senyawa Timokuinon. Berdasarkan hasil penentuan nilai koefisien partisi secara *in silico* melalui halaman web <http://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties> diperoleh data nilai koefisien partisi (log P) senyawa Timokuinon yaitu sebesar 1,90. Namun, data tentang kelarutan senyawa Timokuinon dalam air belum diketahui.

2.2 Koefisien Partisi

Lipofilisitas dapat diukur dengan penentuan distribusi obat antara pelarut organik yang umumnya n-oktanol jenuh dan fase berair. Koefisien partisi mengacu pada rasio konsentrasi senyawa dalam setiap fase dan dapat ditentukan secara eksperimental oleh berbagai metode termasuk terkenal *shake-flask method*, metode potensiometri, dan metode kromatografi. Selain itu, lipofilisitas juga dapat diperkirakan dengan menggunakan perangkat lunak komputer (Andres *et al.*, 2015).

Ketika senyawa yang dapat terionisasi sama banyak pada sistem dua fase pada pH dimana sebagiannya terionisasi, konsentrasinya dalam fase organik dan air secara langsung berhubungan dengan koefisien distribusi (D)

yang diartikan sebagai rasio konsentrasi bagian terionisasi dan tidak terionisasi dari senyawa pada fase organik dan air pada pH yang ditentukan. Kedua koefisien ini P dan D biasanya ditunjukkan dengan rumus (Andres *et al.*, 2015),

$$\log P = \log \frac{C_{n\text{-oktano}}}{C_{\text{air}}} \quad (\text{Andres } et \text{ al.}, 2015)$$

Lipofilisitas adalah sifat fisik yang diukur dalam tahap awal pengujian obat untuk memprediksi transpor molekul dari jalur pencernaan ke dalam sel-sel epitel yang melapisi permukaan dalam dan luar tubuh. Sebagian besar obat melewati hambatan seluler melalui jalur transelular (di sel epitel) yang membutuhkan obat untuk masuk bagian terluar lapisan lipid dari membran sel. Kemudian obat berdifusi ke lapisan lipid bagian dalam dan berjalan melewati sel sebelum menyeberang membran sel sekali lagi untuk keluar (Mostafazadeh, 2012).

Obat yang mempunyai koefisien partisi terlalu besar akan mengalami penurunan jumlah yang dapat melewati membran biologis karena terperangkap dalam membran tersebut. Aturan yang disebut *Lipinski's rule* atau *rule of five* (RO5) biasanya digunakan sebagai syarat suatu obat dikatakan mempunyai sifat farmakokinetik yang baik dalam tubuh manusia, aturan tersebut diantaranya (Singh, Gupta, and Verma, 2013):

- a. Mempunyai atom hidrogen pendonor tidak lebih dari lima (atom oksigen atau atom nitrogen dengan satu atau lebih atom hidrogen).
- b. Mempunyai atom hidrogen penerima tidak lebih dari sepuluh (atom oksigen atau nitrogen).
- c. Memiliki berat molekul lebih kecil dari lima ratus dalton (500 Da).
- d. Mempunyai nilai koefisien partisi dalam pelarut n-oktanol/air tidak lebih dari lima.

e. Tidak mempunyai pelanggaran lebih dari satu.

Lipofilisitas digunakan untuk menggambarkan afinitas senyawa dalam lingkungan lipid. Koefisien partisi calon obat baru antara n-oktanol dan serangkaian buffer berair menjadi ukuran standar lipofilisitas. Lipofilisitas intrinsik (logaritma dari koefisien partisi n-oktanol/air, $\log P_{o/w}$) menggambarkan distribusi kesetimbangan molekul calon obat (tidak terionisasi) antara air dan penyangga berair, dan tidak tergantung pH (Mostafazadeh, 2012).

Lipofilisitas efektif (logaritma koefisien distribusi dari n-oktanol/air) mencerminkan konsentrasi molekul obat netral ditambah semua bentuk terionisasi yang mungkin ada dalam larutan buffer berair pada pH tertentu. Lipofilisitas efektif sering dinyatakan pada pH fisiologis 7,4. Lipofilisitas intrinsik dan efektif setara jika calon obat tidak mengandung gugus fungsional yang dapat terion. Teknik eksperimental yang digunakan untuk mengukur koefisien partisi air/n-oktanol termasuk metode berdasarkan *High Performance Liquid Chromatography* (HPLC) tipe *reversed-phase*, *counter-current chromatography* dan *centrifugal partition chromatography* (Mostafazadeh, 2012).

Menurut Andres *et al.* pada tahun 2015, nilai $\log P$ senyawa obat memiliki kaitan dengan proses pengembangan obat seperti pada Tabel 2.1 (Andres *et al.*, 2015).

Tabel 2.1 Nilai $\log P_{7,4}$ dan Kaitannya dengan Pengembangan Obat (Andres *et al.*, 2015)

$\log P_{7,4}$	Kaitannya untuk Pengembangan Obat
Di bawah 0	Masalah permeabilitas usus dan SSP (Sistem Saraf Pusat); rentan terhadap klirens ginjal
0-1	Menunjukkan keseimbangan yang baik antara permeabilitas dan kelarutan
1-3	Kemungkinan rentang optimum untuk obat oral yang aktif pada SSP dan non-SSP; kecenderungan metabolik rendah; secara umum penetrasi SSP baik

log P_{7,4}	Kaitannya untuk Pengembangan Obat
3-5	Kelarutan menjadi lebih rendah; Kecenderungan menjadi meningkat
Di atas 5	Kelarutan rendah dan bioavailabilitas oral buruk; absorpsi tidak menentu; kecenderungan metabolik tinggi, walaupun potensi masih dapat tetap tinggi

2.3 Kelarutan

Kelarutan dalam air adalah indikator utama dari kelarutan obat di cairan fisiologis pencernaan dan bioavailabilitas obat oral (Keck *et al.*, 2008). Selain kelarutan dalam air, permeabilitas merupakan aspek kritis kedua untuk bioavailabilitas oral. *Biopharmaceutical Classification System* mengelompokkan senyawa obat menurut kelarutannya dalam air dan permeabilitas membran. Senyawa obat yang membutuhkan perbaikan kelarutan untuk meningkatkan bioavailabilitas oral adalah senyawa yang dikelompokkan pada kelas 2 (kelarutan buruk/ permeabel) dan kelas 4 (kelarutan buruk/ permeabilitas buruk). Untuk mendeskripsikan kelarutan, Pharmacopeia (USP) menggunakan tujuh kelarutan yang berbeda seperti pada Tabel 2.2 (Stegemann *et al.*, 2007).

Tabel 2.2 Definisi Kelarutan pada USP (Stegemann *et al.*, 2007)

Bentuk Deskripsi (Definisi Kelarutan)	Bagian Pelarut yang Dibutuhkan untuk Satu Bagian Zat Terlarut	Rentang Kelarutan (mg/ml)	Kelarutan yang Ditetapkan (mg/ml)
Sangat larut (VS)	< 1	> 1.000	1.000
Larut bebas (FS)	Dari 1 sampai 10	100-1.000	100
Larut	Dari 10 sampai 30	33-100	33
Larut sebagian (SPS)	Dari 30 sampai 100	10-33	10
Sedikit larut (SS)	Dari 100 sampai 1.000	1-10	1
Sangat sedikit larut (VSS)	Dari 1.000 sampai 10.000	0,1-1	0,1
Praktis tidak larut (PI)	> 10.000	< 0,1	0,01

Apabila suatu senyawa obat menunjukkan kelarutan dalam air yang buruk, pengembangan obat berfokus pada investigasi karakteristik dari beberapa senyawa obat lain seperti sifat fisika kimia, biofarmasetik, dan dosis target untuk mengidentifikasi dampak potensial dari kelarutan pada pengembangan produk lebih lanjut. Saat ini, $\pm 35-40\%$ senyawa awal diketahui mempunyai kelarutan dalam air kurang dari $10 \mu\text{M}$ atau 5 mg/ml pada pH 7 (Stegemann *et al.*, 2007).

Jumlah kegagalan karena kelarutan yang buruk cenderung akan meningkat pada tahun-tahun mendatang karena calon obat baru umumnya memiliki berat molekul yang lebih tinggi dan struktur molekul lebih rumit dari obat pendahulunya. Molekul obat yang tidak larut dalam air akan sulit untuk dipelajari dengan tes biologi *in vitro* yang ada, sering memberikan hasil tes biologis yang tidak dapat diandalkan, dan dapat mengendap selama penyimpanan atau pada pengenceran (Linàs *et al.*, 2008). Kelarutan dalam air merupakan media referensi untuk memprediksi penyerapan dan bioavailabilitas obat oral.

2.4 Kontribusi Gugus Fungsi

Lipofilisitas atau hidrofilitas suatu senyawa obat berhubungan dengan kelarutan dan aktivitas biologisnya. Kelarutan suatu senyawa sangat mempengaruhi proses absorpsi senyawa obat tersebut. Selain itu, struktur molekul suatu obat juga memiliki peran penting dalam menentukan aktivitas biologis. Struktur dari senyawa obat sangat mempengaruhi sifat lipofilisitas atau hidrofilitas obat tersebut. Berbagai macam gugus fungsi dapat memberikan kontribusi terhadap aktivitas suatu obat (Siswandono dan Soekardjo, 2008).

Pada Timokuinon atau yang bernama lain 2-isopropil-5-metil-1,4-benzokuinon terdapat suatu gugus para-benzokuinon yaitu gugus fungsional yang dimiliki oleh senyawa ini yang diketahui memiliki peranan penting dalam

aktivitas biologisnya dan harus dipertahankan keberadaannya dalam melakukan modifikasi struktur untuk sintesis senyawa baru. Modifikasi struktur dengan penambahan gugus alkil pada cincin para-benzokuinon Timokuinon diketahui dapat meningkatkan aktivitas antikonvulsan atau antikejang dan *antinosiseptive* (mengurangi sensitivitas terhadap rangsangan atau stimulus nyeri) dari senyawa ini (Sousa *et al.*, 2012).

Gugus hidrofilik yang bersifat polar dapat meningkatkan kelarutan molekul obat dalam air. Sedangkan gugus lipofilik yang bersifat nonpolar dapat meningkatkan kelarutan molekul dalam lemak. Di bawah ini merupakan contoh berbagai gugus hidrofilik dan lipofilik yang dapat mempengaruhi kelarutan suatu obat (Siswandono dan Soekardjo, 2008):

Tabel 2.3 Berbagai Gugus Hidrofilik dan Lipofilik yang Dapat Mempengaruhi Kelarutan Suatu Obat (Siswandono dan Soekardjo, 2008)

Gugus Fungsi	Sifat
Rantai hidrokarbon alifatik, alkil, aril, hidrokarbon polisiklik	Lipofilik
Gugus halogen (-I, -Br, dan -Cl)	Lipofilik
Gugus halogen (-F)	Hidrofilik
-OSO ₂ ONa, -COONa, -SO ₂ Na, -OSO ₂ H	Hidrofilik Kuat
-OH, -SH, -O-, =C=C, -CHO, -NO ₂ , -NH ₂ , -NHR, -NR ₂ , -CN, -CNS, -COOH, -COOR, -OPO ₂ H ₂ , -OS ₂ O ₂ H	Hidrofilik Sedang
-C≡CH, -CH=CH ₂	Ikatan Tak Jenuh

2.5 Analisis Spektrofotometri FT-IR

Dua atom bergabung bersama dengan ikatan kimia (ikatan tunggal, ganda, atau rangkap tiga), secara makroskopik dapat berbentuk seperti dua bola yang digabungkan oleh sebuah pegas. Aplikasi gaya seperti (i) peregangan (*stretching*) dari satu atau kedua atom menjauh satu sama lain atau mendekat satu sama lain (ii) pembengkokan (*bending*) dari satu atom yang baik secara

vertikal maupun horizontal dan kemudian pelepasan gaya menghasilkan getaran/vibrasi pada dua atom. Getaran ini bergantung pada kekuatan pegas dan juga mode (*stretching* atau *bending*) dimana gaya diaplikasikan (Kumar, 2006).

Karakteristik yang ditunjukkan suatu vibrasi IR secara kuat dipengaruhi oleh perubahan pada struktur molekul sehingga akan sangat sulit jika identifikasi struktur dengan metode ini saja. Namun, terdapat beberapa kelompok atom yang mudah dikenali dari data spektrum IR. Berikut ini merupakan tabel daerah serapan berbagai gugus fungsi senyawa (Field, Sternhell, and Kalman, 2007):

Tabel 2.4 Tabel Daerah Serapan Berbagai Gugus Fungsi Senyawa (Field, Sternhell, and Kalman, 2007)

Gugus Fungsi	Struktur	Daerah Frekuensi (cm ⁻¹)	Intensitas
Keton	$\begin{array}{c} \text{R} - \text{C} - \text{R}' \\ \\ \text{O} \end{array}$	1705–1725	Kuat
Asam Karboksilat	$\begin{array}{c} \text{R} - \text{C} - \text{OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	3400–2400 1725–1700	Sedang Kuat
Aromatik	C = C	1600 dan 1475	Lemah-sedang
Alkena	C = C	1640–1680	Lemah-sedang
Alkohol	C – OH	1000–1260	Kuat
Alkil Bromida	C – Br	560–800	Kuat
Alkohol terikat-H	O-H	3400–3200	Sedang

Spektrofotometri FT-IR adalah metode yang dapat digunakan dalam analisis kuantitatif maupun kualitatif. Metode ini dapat digunakan untuk menentukan gugus fungsi, khususnya senyawa organik. Setiap serapan pada daerah frekuensi tertentu menggambarkan suatu gugus fungsi spesifik. Hampir setiap senyawa (baik senyawa organik maupun anorganik) yang memiliki ikatan kovalen akan menyerap frekuensi radiasi elektromagnetik pada daerah inframerah (Silverstein *et al.*, 2005).

Pada ikatan kovalen, inti-inti atom berikatan lalu menyerap radiasi inframerah dan menyebabkan molekul berubah menjadi keadaan vibrasi tereksitasi karena ketika molekul suatu senyawa diberikan radiasi inframerah, molekul akan mengalami vibrasi. Setiap jenis ikatan akan menghasilkan vibrasi yang berbeda sehingga setiap jenis ikatan yang berbeda akan menyerap radiasi inframerah pada daerah frekuensi yang memiliki karakteristik tertentu (Pavia *et al.*, 2009). Gugus fungsional yang mempunyai dipol kuat akan meningkatkan absorpsi yang kuat pada spektra IR (Silverstein *et al.*, 2005).

Tabel 2.5 Daerah Absorpsi IR Menggunakan *Hooke's Law* (Silverstein *et al.*, 2005)

Tipe Ikatan	Konstanta <i>Force</i> (<i>f</i>) dalam dyne/cm	Daerah Absorpsi (cm^{-1})	
		Terhitung	Teramati
C – C	$4,5 \times 10^5$	1128	1300-800
C – O	$5,0 \times 10^5$	1113	1300-800
C – H (Alkana)	$5,0 \times 10^5$	3032	3000-2850
C – H (-CH ₂ - bend)			1465
O – H bebas	$7,0 \times 10^5$	3553	3650-3600

Dalam persiapan sampel untuk menemukan spektrum IR dapat berupa gas, cair, padat, atau larutan. Sampel harus secara sempurna bebas dari kelembaban karena bahan seperti NaCl, KBr, CsBr, dan lain-lain biasanya rusak karena adanya kelembaban (Kumar, 2006).

Dua area penting untuk pemeriksaan spektrum pendahuluan adalah area 4000-1300 dan 900-650 cm^{-1} . Bagian frekuensi tinggi dari spektrum disebut bagian grup fungsional. Pita absorpsi yang kurang kuat pada 900-650 cm^{-1} secara umum mengindikasikan struktur nonaromatik. Bagian intermediet dari spektrum 1300-900 cm^{-1} disebut sebagai daerah "*fingerprint*", pola absorpsi pada daerah ini kompleks (Silverstein *et al.*, 2005). Menurut www.philadelphia.edu.jo,

pada grup fungsional spesifik, puncak yang sempit dan tajam biasanya ditunjukkan oleh gugus yang mengandung atom karbon sedangkan puncak yang tumpul dan melebar ditunjukkan oleh adanya ikatan hidrogen.

2.6 Analisis Spektrofotometri UV-Vis

Spektrofotometri UV-Vis merupakan suatu metode pengukuran jumlah radiasi ultraviolet tampak yang diserap oleh suatu senyawa sebagai fungsi panjang gelombang radiasi. Spektroskopi absorpsi ini menggunakan radiasi elektromagnetik antara 190 nm–800 nm dan dibagi kedalam daerah ultraviolet (UV, 190-400 nm) dan visibel (VIS, 400-800 nm). Disebut juga spektroskopi elektronik karena absorpsi radiasi ultraviolet dan visibel oleh sebuah molekul menyebabkan transisi diantara tingkat energi elektronik dari molekul. Penyerapan cahaya UV menyebabkan terjadinya eksitasi elektron dari keadaan dasar ke keadaan tereksitasi (Kumar, 2006).

Beberapa komponen dasar spektrofotometri UV terdiri dari suatu sumber cahaya, monokromator, dan detektor. Lampu deuterium merupakan sumber cahaya yang memancarkan radiasi elektromagnetik di daerah spektrum ultraviolet (UV). Lampu tungsten merupakan sumber cahaya kedua yang digunakan untuk panjang gelombang di daerah spektrum tampak (*visible*). Monokromator merupakan sebuah kisi difraksi yang berperan dalam menyebarkan berkas cahaya kedalam komponen panjang gelombang. Cahaya selanjutnya melewati sampel dan mencapai detektor. Detektor spektrofotometri UV-Vis berperan dalam mengukur intensitas cahaya yang ditransmisikan (I_0) melalui pelarut yang digunakan (blanko) dan dibandingkan dengan intensitas cahaya yang ditransmisikan melalui sampel (I) (Pavia *et al.*, 2009).

Semakin besar jumlah molekul yang menyerap sinar dari panjang gelombang yang diberikan, semakin besar pula luas absorpsi sinar dan semakin tinggi intensitas pada spektrum absorpsi. Hal ini sebagai dasar Hukum Beer-Lambert yang menyebutkan bahwa fraksi radiasi yang diserap sebanding dengan jumlah molekul yang menyerapnya (Kumar, 2006).

Ketika radiasi lewat melalui sebuah larutan, jumlah sinar yang diserap atau diteruskan adalah fungsi eksponensial konsentrasi molekular dari zat terlarut dan juga sebuah fungsi panjang bagian radiasi melalui sampel sehingga,

$$\text{Log } I_0/I = A$$

$$\text{Log } I_0/I = \epsilon c l \quad (\text{Kumar, 2006})$$

Dimana I_0 = intensitas sinar yang lewat melalui sel referensi; I = intensitas sinar yang diteruskan melalui larutan sampel; c = konsentrasi zat terlarut dalam mol^{-1} ; l = bagian panjang sampel dalam cm; dan ϵ = absorbtivitas molar atau koefisien ekstingsi molar bahan yang absorpsi sinarnya diamati. Merupakan konstanta yang menunjukkan karakteristik jenis penyerap yang diberikan (ion molekul) dalam pelarut tertentu pada panjang gelombang tertentu. Rasio I_0/I diketahui sebagai transmitansi T dan logaritma rasio inversi I_0/I diketahui sebagai absorbansi A . Untuk menunjukkan karakteristik absorpsi dari sebuah spektrum, posisi puncak dilaporkan sebagai nilai λ_{maks} (dalam nm) (Kumar, 2006).

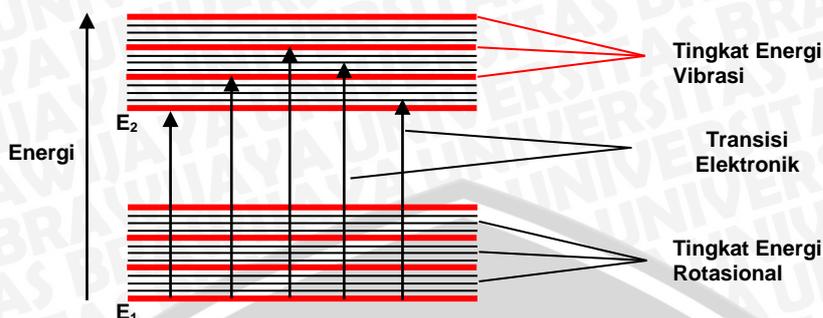
Spektra UV-Vis biasanya diukur pada larutan yang sangat cair dan pelarut harus transparan didalam rentang panjang gelombang yang sedang diukur. Daftar beberapa pelarut yang umum dengan batas panjang gelombang *cut-off* (Tabel 2.7). Di bawah batas ini, pelarut menunjukkan absorbansi berlebihan dan seharusnya tidak digunakan untuk menentukan spektrum UV sampel. Untuk mempersiapkan larutan, sampel secara akurat ditimbang dan dibuat dalam

volume tertentu dalam labu ukur. Diambil aliquot dari larutan ini dan dibuat pengenceran yang sesuai untuk membuat larutan dengan konsentrasi yang diinginkan. Digunakan sekitar 3 ml yang ditempatkan pada bagian *beam* cahaya untuk mengukur spektrum (Kumar, 2006).

Tabel 2.7 Pelarut yang Umum Digunakan dan Batas *Cut-Off*nya (Kumar, 2006)

No.	Pelarut	Panjang Gelombang <i>Cut-off</i> (nm)
1.	Asetonitril	190
2.	Air	191
3.	Sikloheksana	195
4.	Heksana	201
5.	Metanol	203
6.	95% etanol	304
7.	1,4-dioksana	215
8.	Eter	215
9.	Diklorometana	220
10.	Kloroform	237
11.	Karbon tetraklorida	257
12.	Benzena	280

Pada suhu kamar, sebagian besar molekul berada pada tingkat energi vibrasi terendah pada tingkat energi elektronik terendah (*ground state*) atau E_1 . Absorpsi sinar ultraviolet atau tampak menyebabkan elektron dari E_1 menjadi tereksitasi ke tingkat elektronik tereksitasi (E_2). Transisi elektronik terjadi bersama dengan transisi vibrasi dan rotasional sehingga promosi sebuah elektron dapat terjadi dari tingkat dasar energi elektronik E_1 ke tingkat energi vibrasi atau rotasi manapun (E_2). Untuk sebagian besar molekul, absorpsi dihubungkan dengan transisi $\pi \rightarrow \pi^*$ yang mempunyai nilai ϵ lebih besar daripada transisi $n \rightarrow \pi^*$ (Anderson, Bendell, and Groundwater, 2004).



Gambar 2.2 Diagram Skematik Transisi Elektronik dan Tingkat Vibrasi serta Rotasional Molekul yang Mungkin (Anderson, Bendell, and Groundwater, 2004)

Bagian molekul mengandung elektron yang terlibat dalam transisi elektronik yang memberi kenaikan dalam absorpsi disebut kromofor. Panjang gelombang absorpsi terbesar disebut λ_{maks} . Kromofor yang memberi kenaikan menjadi absorpsi energi tinggi (panjang gelombang rendah) dengan nilai intensitas rendah (ϵ), tetapi sebagian besar absorpsi ini hilang pada absorpsi oksigen atmosfer (Anderson, Bendell, and Groundwater, 2004).

Tabel 2.8 Panjang Gelombang Kromofor Sederhana dan Tidak Terkonjugasi (Anderson, Bendell, and Groundwater, 2004)

λ_{maks}/ nm	Kromofor	Transisi Penyebab Absorpsi
~ 150	C – C atau C – H Elektron berikatan- σ	$\sigma \rightarrow \sigma^*$
~ 185-195	-X: (X = O, N, S) Elektron <i>lone pair</i>	$n \rightarrow \sigma^*$
~ 300	C = O: Elektron <i>lone pair</i>	$n \rightarrow \pi^*$
~ 190		$n \rightarrow \sigma^*$
~ 190	C = C Elektron berikatan- π	$\pi \rightarrow \pi^*$