


No	5	
Nama	NELLY NURONIAH	
No Mhs	00/140697/EPA/004	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Karna Wijaya, M.Eng	
Skripsi	HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR MOLEKUL DAN SIFAT FISIK (INDEKS BIAS, ENTHALPI PENGUAPAN DAN TEMPERATUR TEKANAN UAP) BERBAGAI SENYAWA ORGANIK	
Abstrak	<p>Telah dilakukan analisis regresi linear multivariat Hubungan Kuantitatif Struktur–Sifat fisika (HKSS) dari beberapa senyawa organik terhadap deskriptor fragmental. Deskriptor fragmental setiap senyawa dijabarkan dalam bentuk jenis atom dan tipe ikatan masing-masing atom. Pengkajian dilakukan masing-masing terhadap empat sifat fisik senyawa berupa indeks bias, entalpi penguapan (Kj.mol^{-1}), kelarutan dalam air (mg.L^{-1}) dan temperatur tekanan uap ($^{\circ}\text{C}$) sebagai fungsi linear dari seluruh deskriptor. Pemilihan model persamaan terbaik ditentukan dari analisis regresi multilinear.</p> <p>Model alternatif persamaan HKSS terbaik untuk indeks bias menunjukkan bahwa indeks bias berhubungan secara linear dengan: $n(\text{C}_{\text{prim}})$, $n(\text{C}_{\text{sek alf}})$, $n(\text{C}_{\text{ter alf}})$, $n(\text{C}_{\text{kwar alf}})$, $(\text{C}_{\text{sek arm}})$, $n(\text{O})$, $n(\text{Cl})$, $n(\text{C}-\text{C}_{\text{sikl}})$, $n(\text{C}_2=\text{C}_3)$, $n(\text{C}_3=\text{C}_4)$, $n(\text{C}_4=\text{C}_5)$, $n(\text{C}_1=\text{C}_2)$, $n(\text{C}_2=\text{C}_3)$, $n(\text{C}_3=\text{C}_4)$, $n(\text{C}_4=\text{C}_5)$, $n(\text{C}_5=\text{C}_6)$, $n(\text{C}_6=\text{C}_7)$, $n(\text{C}-\text{O})$, $n(\text{C}-\text{F})$, $n(\text{C}-\text{Cl})$, $n(\text{C}-\text{Br})$, $n(\text{C}=\text{O})$, $n(\text{N}-\text{H})$, $n(\text{S}-\text{H})$, $n(\text{ortho})$, $n(\text{meta})$, $n(\text{HxBM})$, dengan parameter statistik $n = 340$; $r = 0,978$; $\text{SD} = 1,020.10^{-2}$; $F_{\text{hitung}} = 243,306$</p> <p>Model alternatif persamaan HKSS terbaik untuk entalpi penguapan (kJmol^{-1}) menunjukkan bahwa entalpi penguapan (kJmol^{-1}) berhubungan secara linear dengan: $n(\text{C}_{\text{prim alf}})$, $n(\text{C}_{\text{sek alf}})$, $n(\text{C}_{\text{ter alf}})$, $n(\text{C}_{\text{sek sikl}})$, $n(\text{C}_{\text{ter sikl}})$, $n(\text{C}_{\text{ter arm}})$, $n(\text{C}-\text{H})$, $n(\text{C}=\text{C}_{\text{arm}})$, $n(\text{C}_1=\text{C}_2)$, $n(\text{C}_1=\text{C}_2)$, $n(\text{C}_2=\text{C}_3)$, $n(\text{C}_4=\text{C}_5)$, $n(\text{C}_4=\text{C}_5)$, $n(\text{C}-\text{O})$, $n(\text{C}-\text{Br})$, $n(\text{C}=\text{O})$, $n(\text{O}-\text{H})$, $n(\text{S}-\text{H})$, $n(\text{E})$, $n(\text{Z})$, (BM), $n(\text{HXBM})$, dengan parameter statistik $n = 93$; $r = 0,988$; $\text{SD} = 0,988$; $F_{\text{hitung}} = 950,199$.</p> <p>Model alternatif persamaan HKSS terbaik untuk temperatur tekanan uap ($^{\circ}\text{C}$) menunjukkan bahwa temperatur tekanan uap ($^{\circ}\text{C}$) berhubungan secara linear dengan: $n(\text{C}_{\text{prim alf}})$, $n(\text{C}_{\text{ter alf}})$, $n(\text{C}_{\text{kwar}})$, $n(\text{C}_{\text{terr arm}})$, $n(\text{C}-\text{C}_{\text{sikl}})$, $n(\text{C}=\text{C}_{\text{arm}})$, $n(\text{C}_1=\text{C}_2)$, $n(\text{C}_3=\text{C}_4)$, $n(\text{C}-\text{O})$, $n(\text{C}-\text{S})$, $n(\text{C}-\text{Br})$, $n(\text{C}=\text{O})$, $n(\text{O}-\text{H})$, $n(\text{S}-\text{H})$, (BM), $n(\text{HXBM})$, dengan parameter statistik $n = 185$; $r = 0,998$; $\text{SD} = 11,496$; $F_{\text{hitung}} = 267,899$.</p>	