


No	4	
Nama	ADE KUMALASARI	
No Mhs	98/119446/PA/7178	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Mudasir, M.Eng	
Skripsi	ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-SIFAT ANTARA PARAMETER TEORITIK DAN TEMPERATUR TRANSISI GELAS DARI TURUNAN POLIAKRILAT	
Abstrak	<p>Telah dilakukan analisis hubungan kuantitatif struktur-sifat (HKSS) antara parameter teoritik dan temperatur transisi gelas (Tg) dari suatu set senyawa polimer turunan poliakrilat. Polimer dimodelkan dengan program Hyperchem dengan metode semi-empirik AM1 dalam bentuk trimer-nya. Perhitungan parameter elektronik dilakukan dengan <i>single point</i>, sedangkan parameter atau deskriptor lainnya dihitung dengan alat <i>QSAR Properties</i> dalam program Hyperchem.</p> <p>Terdapat 12 deskriptor yang dianalisis, yaitu: (1) muatan atom kepala (qC_1), (2) muatan atom ekor (qC_2), (3) muatan atom C yang terikat pada atom kepala (qC_3), (4) muatan atom O yang terikat rangkap dua pada atom C_3 (qO_1), (5) muatan atom O yang terikat pada atom C_3 (qO_2), (6) momen dwi kutub (μ), (7) luas pennukaan van der Waals (A_{vdW}), (8) volume van der Waals (V_{vdW}), (9) koefisien partisi oktanol-air ($\log P$), (10) refraktivitas molar (MR), (11) polarisabilitas (α), dan (12) berat molekul (M).</p> <p>Dari analisis HKSS, didapat persamaan terbaik untuk mendeskripsikan nilai $\log Tg$, sebagai berikut:</p> $\log Tg = 3,072 + 0,834 qC_1 + 0,251 qO_2 - 0,0748\mu - 0,00231 A_{vdW} - 0,0000791 V_{vdW} + 0,00629 MR$ <p>dengan $n = 20$; $r = 0,931$; $r^2 = 0,867$; $PRESS = 0,003$; $F_{hitung} = 14,071$ dan $F_{hitung}/F_{tabel} = 4,819$</p>	