

KAJIAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR SIFAT TERHADAP SUHU TRANSISI GELAS TURUNAN POLI(ASAM AKRILAT)

Ponco Iswanto¹, Iqmal Tahir² dan Harno Dwi Pranowo²

¹Jurusan Kimia, FMIPA - Unsoed
Purwokerto

²AIC, Jurusan Kimia - FMIPA UGM
Jl. Grafika 2, Yogyakarta

ABSTRAK

KAJIAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR SIFAT TERHADAP SUHU TRANSISI GELAS TURUNAN POLI(ASAM AKRILAT). Telah dilakukan penelitian tentang hubungan kuantitatif struktur-sifat (HKSS) terhadap suhu transisi gelas (T_g) turunan poli(asam akrilat). Penelitian dilakukan dengan cara menggunakan model trimer dari polimer-polimer tersebut, dalam bentuk struktur isotaktik dan menggunakan perhitungan semiempirik PM3. Analisis hubungan T_g polimer dengan sifat fisik dan kimia dilakukan melalui analisis regresi multilinear dengan variabel tidak bebas adalah T_g /BM dan variabel bebas adalah muatan bersih atom C₁ dan C₂ (atom karbon kepala dan ekor pada struktur rantai), momen dwi kutub (μ), polarisabilitas (α), indeks refraktivitas (R_D), koefisien partisi n-oktanol - air ($\log P$), volume (V_{sw}) dan luas permukaan van der Waals (A_{sw}), kelarutan dalam air ($\log S_w$) dan indeks Parachor. Hasil dari perhitungan statistik diperoleh persamaan regresi yang menggambarkan hubungan T_g polimer dengan deskriptor-deskriptorunya yaitu: $(T_g/BM) = 8,764 + 0,315(qC_1) + 0,513(\alpha) - 0,253(\mu) - 0,0515(R_D) - 0,876(\log P) - 0,0411(V_{sw}) + 0,02215(A_{sw}) + 0,005242(\text{Parachor}) - 1,018(\log S_w)$ dengan $n=29$; $r = 0,904$; $r^2 = 0,817$; $SD = 0,441$; $F \text{ hitung} = 9,395$; $F \text{ tabel} = 2,423$; dan $F \text{ hitung}/F \text{ tabel} = 3,878$ PRESS = 3,7196

Kata kunci: Analisis HKSS, suhu transisi gelas, poli(asam akrilat), muatan bersih atom

ABSTRACT

QUANTITATIVE STRUCTURE PROPERTY RELATIONSHIP (QSPR) STUDY OF GLASS TRANSITION TEMPERATURES OF POLY(ACRYLIC ACID) DERIVATES. Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) study of glass transition temperatures of poly(acrylic acid) derivatives has been conducted. The study was done by using molecular modelling of polymers assumed in trimer compound, in their isotactic form. Calculation was performed by semiempirical PM3 method. The relationship analysis between T_g and physicochemical properties of polymers was done by multilinear regression analysis, with T_g /BM as dependent variable and 10 independent variables such as atomic net charges of carbon as head and tail of the polymer chain (qC_1 and qC_2), dipole moment (μ), polarizability (α), refractivity index (R_D), $\log P$, volume (V_{sw}) and surface area of van der Waals (A_{sw}), solubility in water ($\log S_w$) and parachor index. The relationship between T_g and the descriptors which performed by statistical calculation is: $(T_g/BM) = 8,764 + 0,315(qC_1) + 0,513(\alpha) - 0,253(\mu) - 0,0515(R_D) - 0,876(\log P) - 0,0411(V_{sw}) + 0,02215(A_{sw}) + 0,005242(\text{Parachor}) - 1,018(\log S_w)$, with $n=29$; $r = 0,904$; $r^2 = 0,817$; $SD = 0,441$; $F \text{ calc} = 9,395$; $F \text{ table} = 2,423$ dan $F \text{ calc}/F \text{ table} = 3,878$; PRESS = 3,7196

Key words: QSPR, glass transition temperature, poly(acrylic acid), atomic net charge

PENDAHULUAN

Penelitian kimia komputasi telah banyak dilakukan dan meliputi berbagai bidang terapan kimia [1]. Salah satu penelitian terapan kimia komputasi adalah kajian *Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR)* [2,3]. Kajian ini membahas hubungan sifat fisik suatu senyawa sebagai fungsi dari struktur senyawa. Kajian ini juga banyak digunakan dalam mempelajari bahan polimer seperti: memprediksi suhu transisi gelas senyawa polimer [4], hubungan suhu transisi gelas dengan struktur unit ulang. Suhu transisi gelas, T_g , adalah suhu dimana terjadi perubahan sifat

fisik polimer dari keadaan kaku menjadi elastis. Parameter T_g merupakan salah satu parameter penting yang harus diketahui sebelum polimer semi-kristalin digunakan lebih lanjut [5].

Sementara itu, penelitian mengenai sintesis polimer dalam rangka memperoleh polimer yang berkualitas terus dilakukan. Seperti halnya pada senyawa poli(asam akrilat) telah banyak disintesis senyawa turunannya. Poli(asam akrilat) banyak digunakan sebagai pendispersi warna pada cat, resin penakar ion dan adesif. Oleh karena itu perlu ada kajian

yang dapat memberikan informasi kepada peneliti yang bergerak di bidang sintesis polimer tentang model perkiraan sifat fisik polimer turunan poli(asam akrilat).

Pada penelitian ini telah dilakukan kajian QSPR yang mengkaji suhu transisi gelas senyawa poli(asam akrilat) dan turunannya sebagai fungsi linear dari struktur elektronik dan beberapa sifat fisik senyawa berdasarkan analisis Hansch. Hasil kajian QSPR tersebut diharapkan dapat digunakan sebagai alat untuk memprediksi suhu transisi gelas teoritik beberapa senyawa turunan poli(asam akrilat) baru. Tujuan penelitian ini adalah dapat mengetahui hubungan kuantitatif linearistik antara struktur elektronik senyawa poli(asam akrilat) hasil perhitungan kimia komputasi dan suhu transisi gelas senyawa turunan poli(asam akrilat).

METODE PERCOBAAN

Bahan

Pada penelitian ini digunakan data suhu transisi gelas hasil eksperimen satu seri turunan poli(asam akrilat) yang mempunyai berat molekul tinggi seperti tercantum pada Tabel 1.

Alat

Komputer yang digunakan dalam penelitian ini menggunakan piranti keras yaitu Intel Pentium III processor, RAM 256 MHz dan HD 20 GB. Piranti lunak yang digunakan adalah HyperChem pro versi 6.01 dari Hypercube, Inc., SPSS for Windows versi 10.01 dari SPSS, Inc., dan Toolkit for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compounds versi 1.0, John Wiley and Sons, Inc.

Cara Kerja

Model Struktur Polimer

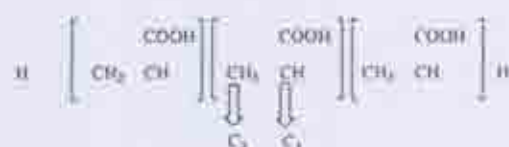
Keuntungan dalam melakukan optimasi struktur polimer yang besar (dengan berat molekul tinggi) dapat didekatkan melalui model trimer. Polimer yang dikaji digambarkan dalam bentuk model trimer yang mempunyai struktur isotaktik, kepala ke ekor seperti pada Gambar 1. Penggambaran model trimer dilakukan dengan menggunakan Polymer Builder (Databases Menu) yang ada pada HyperChem pro versi 6.01. Pendekatan ini menggunakan beberapa asumsi. Asumsi pertama adalah monomer yang berada di tengah model trimer merupakan representasi dari monomer tengah pada tiap rantai polimer dan mempunyai sifat yang mirip. Kedua, tiap rantai polimer diakhiri dengan atom hidrogen sehingga ada pengaruh elektrostatik yang sama terhadap monomer tengah. Kemudian kajian dilakukan untuk atom-atom karbon pada monomer tengah tersebut seperti lampak pada Gambar 1. Atom C₁ merupakan atom C kepala atau atom C yang tersubstitusi sedangkan C₂ untuk C ekor.

Tabel 1. Data suhu transisi gelas [7] eksperimen poli(asam akrilat) dan turunannya[9]

No	Jenis Polimer	Suhu Transisi Gelas (K)
1	Poli(asam akrilat)	379
2	Poli(metakrilat)	281
3	Poli(etilakrilat)	251
4	Poli(sek-butilakrilat)	253
5	Poli(tert-butilakrilat)	315
6	Poli(n-butilakrilat)	219
7	Poli(metil metakrilat)	378
8	Poli(etil metakrilat)	324
9	Poli(isopropil metakrilat)	327
10	Poli(etil kloroakrilat)	366
11	Poli(2-kloroetil metakrilat)	365
12	Poli(tert-butil metakrilat)	380
13	Poli(fenil metakrilat)	393
14	Poli(n-oktil akrilat)	208
15	Poli(n-oktil metakrilat)	253
16	Poli(n-heptil akrilat)	213
17	Poli(n-nonil akrilat)	216
18	Poli(n-eksal akrilat)	216
19	Poli(n-propil akrilat)	229
20	Poli(3,3-dimetilbutil metakrilat)	318
21	Poli(n-butil α-kloroakrilat)	330
22	Poli(sek-butil metakrilat)	330
23	Poli(3-pentil akrilat)	257
24	Poli(n-eksal metakrilat)	268
25	Poli(n-butil metakrilat)	293
26	Poli(2-metoksietil metakrilat)	293
27	Poli(n-propil metakrilat)	306
28	Poli(n-propil α-kloroakrilat)	344
29	Poli(sek-butil α-kloroakrilat)	347

Optimasi Struktur Geometri

Sebelum langkah optimasi dilakukan, struktur trimer ditetapkan sudut torsinya sedemikian sehingga strukturnya isotaktik (seperti pada Gambar 1), karena untuk memodelkan struktur polimer sindiotaktik dan ataktik diperlukan model yang lebih panjang rantainya. Sedangkan kemampuan perangkat lunak dan keras yang digunakan sangat terbatas. Untuk monomer, sudut ikatan gugus karboksilat dengan ikatan -CH₂-CH- ditetapkan sebesar 109°. Seluruh struktur trimer dan monomer dioptimasi menggunakan Hyperchem pro versi 6.01 dengan metode semiempirik PM3 (Parameterization Model 3). Langkah optimasi struktur monomer untuk memperoleh data momen dwi kutub



Gambar 1. Model trimer untuk poli(asam akrilat) dengan atom-atom yang akan dikaji.

yang digunakan sebagai deskriptor. Kondisi perhitungan optimasi struktur dapat dilihat pada Tabel 2.

Tabel 2. Kondisi optimasi struktur trimer dan monomer

Metode	Spin Pairing	State	Algoritma	RMS Gradient (kkal/Å.mol)
Semiempirik PM3	RHF	Lowest	Polak-Ribiere	0,001

Langkah optimasi struktur ini akan menghasilkan data-data diantaranya muatan bersih atom C₁ dan C₂, dan momen dwi kutub.

Sifat QSPR Monomer sebagai Deskriptor

Sifat QSPR monomer dihitung sebagai konsekuensi asumsi pertama. Langkah ini diawali dengan membuka file monomer, kemudian dilanjutkan dengan perhitungan sifat QSPR. Seluruh perhitungan deskriptor yang digunakan untuk mencari persamaan matematika dalam memprediksi suhu transisi gelas polimer dapat dilihat pada Tabel 3.

Penentuan Persamaan Terbaik

Langkah kerja ini bertujuan untuk memperoleh persamaan matematika "terbaik" yang digunakan untuk

memprediksi T_g polimer. Karena T_g bersifat intensif, maka nilai T_g eksperimen pada Tabel 1 diubah ke dalam bentuk T_g/BM, dimana BM adalah harga berat molekul monomer yang dihasilkan dari perhitungan sifat QSPR pada HyperChem. Harga T_g/BM bersifat ekstensif yang dapat digunakan untuk uji korelasi. Kemudian harga T_g/BM diplot sebagai variabel tak bebas, dan dilanjutkan dengan plot seluruh data deskriptor sebagai variabel bebas. Kemudian persamaan regresi multilinear (regresi linear berganda) ditentukan dengan menggunakan perangkat lunak SPSS versi 10.01.

Adapun bentuk persamaan umum regresi multilinear adalah sebagai berikut:

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_kx_k$$

dimana:

- Y = variabel tak bebas
- b₀ = tetapan (intersep)
- x₁...x_k = deskriptor ke-1 hingga ke-k
- b₁...b_k = koefisien deskriptor ke-1 hingga ke-k

HASIL DAN PEMBAHASAN

Optimasi Struktur dan Sifat QSPR

Perhitungan optimasi struktur yang dilakukan menggunakan metode semiempirik PM3, karena PM3 merupakan reparameterisasi dari AM1 (Austin

Tabel 3. Deskriptor dan cara perhitungan yang dilakukan

No	Symbol	Deskriptor	Satuan	Cara Perhitungan
1	qC ₁	Muatan C kepala	Coulomb	Semiempirik PM3, HyperChem, optimasi trimer
2	qC ₂	Muatan C ekor	Coulomb	Semiempirik PM3, HyperChem, optimasi trimer
3	α	Polarisabilitas molekul	Å ³	QSAR properties, HyperChem, monomer
4	μ	Momen dwi kutub	Debye	Semiempirik PM3, HyperChem, optimasi monomer
5	R ₀	Indeks refraksi	-	QSAR properties, HyperChem, monomer
6	Log P	Koefisien partisi n-oktanol - air	-	QSAR properties, HyperChem, monomer
7	BM	Berat molekul	g.mol ⁻¹	QSAR properties, HyperChem, monomer
8	V _{vdw}	Volume van der Waals	Å ³	QSAR properties, HyperChem, monomer
9	A _{vdw}	Luas permukaan van der Waals	Å ²	QSAR properties, HyperChem, monomer
10	Log Sw	Kelarutan dalam air	g/100g air	Toolkit for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compounds, Monomer
11	Paracher	-	-	Toolkit for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compounds, Monomer

Model 1), sesuai untuk senyawa organik, dan terdapat pula parameter untuk beberapa unsur transisi.

Hasil yang diperoleh dari perhitungan ini adalah muatan bersih C_1 dan C_2 jika optimasi dilakukan terhadap model trimer, dan momen dwi kutub jika optimasi dilakukan terhadap monomer. Setelah data perhitungan hasil optimasi struktur diperoleh, kemudian data deskriptor lain diperoleh dengan menggunakan fasilitas perhitungan sifat QSPR yang terdapat dalam *Hyperchem pro versi 6.01*. Sifat QSPR dihitung terhadap monomer tanpa melalui optimasi struktur, karena sifat QSPR ini tidak melibatkan struktur elektronik dari molekul. Data-data hasil optimasi struktur dan sifat QSPR dapat dilihat pada Tabel 4.

Pada Tabel 4 ada beberapa fenomena yang dapat diamati, seperti besarnya nilai muatan bersih tampak dipengaruhi oleh jenis substituen pada C kepala dan gugus alkil yang menggantikan atom H pada gugus asam karboksilat. Misalnya pada senyawa poli(etil kloroakrilat), poli(sek-butil- α -kloroakrilat), muatan bersih C kepala bertanda positif. Hal ini disebabkan adanya atom klor pada struktur. Pengaruh atom elektronegatif (atom klor) juga mempengaruhi nilai momen dwi kutub senyawa, misalnya pada poli(n-propil- α -kloroakrilat) dan poli(sek-butil- α -kloroakrilat) yang mempunyai momen dwi kutub 3,485 D dan 4,757 D. Sedangkan untuk nilai koefisien partisi n-oktanol-air (Log P) dipengaruhi oleh substituen alkil yang membentuk gugus ester pada rantai samping polimer ($-COOR'$) makin panjang rantai alkil pada R' maka nilai log P makin besar yang berarti pula nilai kelarutan dalam air akan semakin kecil. Hal ini juga dapat dilihat pada nilai Log Sw (kelarutan dalam air), makin panjang rantai alkil pada $-COOR'$ menyebabkan semakin kecil kelarutan senyawa polimer di dalam air.

Seluruh data yang dihasilkan baik melalui optimasi struktur model trimer dan monomer, maupun dengan cara perhitungan sifat QSPR monomer, akan digunakan untuk analisis QSPR.

Analisis QSPR

Analisis regresi multilinear dilakukan terhadap dua puluh sembilan polimer dengan variabel tidak bebas adalah T_g/BM dan variabel bebas adalah muatan bersih atom C_1 dan C_2 (atom karbon kepala dan ekor pada struktur rantai), momen dwi kutub (μ), polarisabilitas (α), indeks refraktivitas (R_D), koefisien partisi n-oktanol-air (Log P), volume (V_{vdw}) dan luas permukaan van der Waals (A_{vdw}), kelarutan dalam air (log Sw) dan indeks *Parachor*.

Analisis regresi multilinear dilakukan dengan SPSS versi 10.01 dan metode yang digunakan adalah Metode *Backward*. Analisis ini menghasilkan 10 model persamaan QSPR yang dapat dilihat pada Tabel 5.

Dengan mempertimbangkan besarnya nilai koefisien korelasi, dan jumlah variabel yang terlibat, maka dipilih persamaan (model) 2 sebagai persamaan

Tabel 5. Model Persamaan QSPR hasil Analisis Regresi Multilinear

Model	r	r ²	SD	F	F _{hitung} /F _{tabel}	PRESS
1	0,304	0,817	0,453	8,011	3,311	3,7237
2	0,504	0,817	0,441	9,395	3,878	3,7196
3	0,903	0,816	0,430	11,091	4,312	3,7202
4	0,903	0,815	0,423	13,209	5,110	3,7742
5	0,901	0,812	0,415	15,789	6,194	3,8200
6	0,887	0,786	0,432	16,941	6,417	4,3913
7	0,881	0,776	0,433	20,748	7,473	4,6354
8	0,866	0,749	0,440	24,896	8,323	5,0469
9	0,862	0,743	0,446	37,556	11,147	5,1736
10	0,840	0,721	0,456	69,713	16,559	5,6170

QSPR terbaik. Pemilihan persamaan 2 sebagai model persamaan QSPR terbaik didukung pula oleh parameter jumlah simpangan kuadrat (PRESS) yang berharga paling kecil, yaitu 3,7196.

Model persamaan QSPR terbaik yang diperoleh dari analisis, adalah

$$(T_g/BM) = 8,764 + 0,315(qC_1) + 0,513(\alpha) - 0,253(\mu) - 0,0515(R_D) - 0,876(\text{Log } P) - 0,0411(V_{vdw}) + 0,02215(A_{vdw}) + 0,005242(\text{Parachor}) - 1,018(\text{Log } S_w)$$

dengan :

$$n = 29; r = 0,904; r^2 = 0,817; SD = 0,441; F_{hitung} = 9,395; F_{tabel} = 2,423 \text{ dan } F_{hitung}/F_{tabel} = 3,878; PRESS = 3,7196.$$

Harga n merupakan jumlah seri senyawa poli(asam akrilat) dan turunannya yang dianalisis yaitu dua puluh sembilan senyawa. Harga SD adalah standar deviasi yang berharga cukup kecil yaitu 0,441. Harga r^2 pada model ini adalah 0,817, dimana harga ini mempunyai arti bahwa 81,7% variasi harga T_g/BM senyawa poli(asam akrilat) dan turunannya diakibatkan oleh variasi harga deskriptor pada persamaan QSPR.

Model persamaan QSPR yang dipilih merupakan model yang mengandung kontribusi struktur elektron dan fenomena sterik pada rantai polimer. Model yang terpilih mengandung variabel muatan C_1 kepala, polarisabilitas, momen dwi kutub dan kontribusi sterik yaitu variabel indeks refraktivitas, koefisien partisi n-oktanol-air, volume dan luas permukaan van der Waals, Indeks *Parachor* dan kelarutan dalam air. Analisis QSPR juga menghasilkan harga F. Harga F menyatakan ukuran perbedaan signifikansi dari model persamaan QSPR yang diperoleh. Harga F adalah 9,395 dengan rasio F_{hitung}/F_{tabel} adalah 3,878 (> 1). Hal ini berarti $F_{hitung} > F_{tabel}$ maka daerah penerimaan hipotesis nol (H_0) yang menyatakan bahwa tidak ada signifikansi statistik pada persamaan QSPR yang dihasilkan ditolak. Daerah penerimaan H_1 yang menyatakan adanya signifikansi statistik pada persamaan QSPR diterima, maka persamaan QSPR yang diperoleh dapat diterima sebagai persamaan QSPR terbaik yang dapat digunakan untuk memprediksi nilai T_g/BM turunan poli(asam akrilat).

Berdasarkan analisis korelasi variabel, terlihat bahwa variabel V_{vdw} (volume van der Waals)

Tabel 4. Hasil perhitungan optimasi struktur model polimer

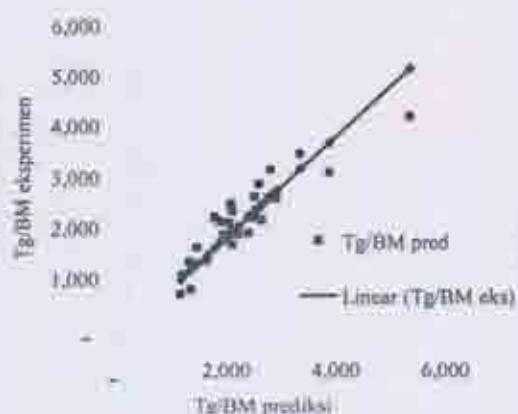
Senyawa	T_g (K)	ρ_1 (g/cm ³)	ρ_2 (g/cm ³)	Momen dw kutub (D)	Polarisitas (\AA^2)	F_0	$\log P$	EM (cm ²)	V_{vdw} (\AA^3)	λ_{vdw} (\AA^2)	Paradise	$\log Sw$ (g/100g)
Poli(asam akrilat)	5,259	-0,075697	-0,100776	1,810	6,810	17,291	0,583	72,064	65,192	92,250	182	0,340
Poli(metakrilat)	5,264	-0,090500	-0,100220	1,786	8,845	22,060	0,616	86,090	83,271	113,358	202	0,690
Poli(metakrilat)	2,507	-0,081473	-0,102283	1,864	10,480	26,808	0,959	100,117	100,294	134,688	242	0,189
Poli(akrilat)	1,974	-0,088253	-0,109128	1,735	14,150	35,751	1,840	128,171	129,374	160,808	322	-0,650
Poli(tersebutakrilat)	2,420	-0,093963	-0,109544	1,663	13,863	35,225	1,692	130,187	124,829	150,941	322	-0,390
Poli(n-butakrilat)	1,709	-0,080561	-0,106268	1,872	14,150	35,934	1,824	128,171	131,665	169,605	322	-0,850
Poli(metil metakrilat)	3,776	-0,024157	-0,107105	1,700	10,480	26,418	0,894	100,117	97,981	128,540	242	0,410
Poli(etil metakrilat)	2,838	-0,014318	-0,102906	1,601	12,315	31,166	1,237	114,144	114,934	149,196	282	0,110
Poli(isopropil metakrilat)	2,551	-0,021537	-0,123497	1,896	14,150	35,584	1,690	128,171	130,656	164,830	322	-0,420
Poli(etil kloroakrilat)	2,720	0,249152	-1,255710	2,449	12,408	31,600	0,861	134,562	112,941	146,971	279,3	-0,330
Poli(2-kloroetil metakrilat)	2,456	-0,018429	-0,117558	2,611	14,243	35,761	1,598	148,589	130,927	169,932	319,3	-0,660
Poli(tersebutakrilat)	2,672	-0,032309	-0,103868	1,878	15,985	40,221	1,728	142,198	146,118	181,017	362	-0,900
Poli(fenil metakrilat)	2,423	-0,027196	-0,103014	1,741	18,305	51,004	1,386	162,188	152,327	181,818	377,4	-1,380
Poli(α -oktil akrilat)	1,129	-0,083806	-0,023767	1,839	21,490	54,338	3,409	184,228	198,219	247,521	482	-3,990
Poli(α -oktil metakrilat)	1,276	0,048370	-0,110401	1,774	23,325	58,695	3,687	198,305	215,501	270,577	522	-3,300
Poli(α -heptil akrilat)	1,251	-0,095255	-0,089067	1,874	19,655	49,737	3,013	170,252	181,908	230,476	442	-3,450
Poli(α -nonil akrilat)	1,089	-0,078572	-0,104129	1,907	23,325	58,939	3,805	198,305	215,096	267,361	522	-3,530
Poli(β -heksil akrilat)	1,383	-0,082632	-0,105767	1,873	17,820	45,156	2,616	156,225	165,187	210,065	402	-1,910
Poli(α -propil akrilat)	2,006	-0,081454	-0,104955	1,865	12,315	31,333	1,427	114,144	114,863	149,555	282	-0,330
Poli(3,3-dimetilbutil metakrilat)	1,868	-0,021899	-0,114588	2,796	19,655	49,314	2,865	170,252	180,680	221,998	442	-1,960
Poli(α -butil α -kloroakrilat)	2,029	-0,025389	-0,142932	2,448	16,078	40,725	1,726	162,616	146,537	186,923	359,3	-1,390
Poli(α -butil metakrilat)	2,321	-0,014429	-0,104150	1,670	15,985	40,108	2,118	142,198	146,951	182,241	362	-0,950
Poli(3-pentil akrilat)	1,807	-0,080688	-0,116899	1,730	15,985	40,275	2,309	142,198	143,259	174,498	362	-1,180
Poli(α -heksil metakrilat)	1,374	-0,021328	-0,106426	1,778	19,655	49,483	2,894	170,252	181,979	230,117	442	-2,220
Poli(β -butil metakrilat)	2,060	-0,018238	-0,106972	1,774	15,985	40,291	2,102	142,198	148,456	189,656	362	-1,160
Poli(2-metoksietil metakrilat)	2,032	-0,026227	-0,111612	2,930	14,787	37,461	0,729	144,170	141,714	185,216	339,2	0,270
Poli(α -propil metakrilat)	2,387	-0,022541	-0,103378	1,582	14,150	35,690	1,703	128,171	131,654	169,607	322	-0,630
Poli(α -propil α -kloroakrilat)	2,315	-0,779923	-1,244210	3,485	14,243	36,134	1,329	148,589	129,661	167,382	319,3	-0,860
Poli(α -butil α -kloroakrilat)	2,134	0,051332	-3,452610	4,757	16,078	40,542	1,742	162,616	144,958	180,015	359,3	-1,190

merupakan variabel yang paling berpengaruh terhadap nilai T_g/BM . Hal ini dapat dilihat dari nilai signifikansi sebesar 0,035 pada tingkat kepercayaan 95%, seperti pada Tabel 6.

Tabel 6. Signifikansi variabel bebas terhadap nilai T_g/BM

Variabel Bebas	Signifikansi	Tingkat Kepercayaan
qC_1	0,586	95%
α	0,465	
μ	0,162	
R_u	0,786	
Log P	0,191	
V_{vdw}	0,035	
A_{vdw}	0,113	
Parachor	0,830	
Log S_w	0,056	

Melalui persamaan QSPR yang diperoleh, komparasi antara data eksperimen dengan hasil perhitungan (prediksi) dapat dilakukan untuk mengetahui seberapa besar penyimpangan yang terjadi. Visualisasi komparasi antara data eksperimen dan prediksi dapat dilihat pada Gambar 2.



Gambar 2. Grafik antara T_g/BM eksperimen terhadap T_g/BM prediksi untuk seri polimer poli(asam akrilat) dan turunannya. Garis linear menandakan T_g/BM eksperimen = T_g/BM prediksi.

KESIMPULAN

Hasil kajian hubungan kuantitatif struktur-sifat untuk seri senyawa polimer poli(asam akrilat) dan turunannya diperoleh model QSPR yang terbaik dengan:

$$(T_g/BM) = 8,764 + 0,315(qC_1) + 0,513(\alpha) - 0,253(\mu) - 0,0515(R_u) - 0,876(\text{Log } P) - 0,0411(V_{vdw}) + 0,02215(A_{vdw}) + 0,005242(\text{Parachor}) - 1,018(\text{Log } S_w)$$

dengan :

$$n=29; r=0,904; r^2=0,817; SD=0,441; F_{hitung}=9,395$$

$$F_{tabel}=2,423 \text{ dan } F_{hitung}/F_{tabel}=3,878$$

$$PRESS=3,7196.$$

DAFTAR PUSTAKA

- [1] TAHIR, I., SETIAJI, B., WAHYUNINGSIH, T. D., RAHARJO, T. J. dan NOEGROHATI, S., *Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur Elektronik dan Aktivitas Tabir Surya In Vitro Senyawa Isoamilsinamat Tersubstitusi*, (2001)
- [2] CAO, C. and LIN, Y., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **43** (2003) 643-650
- [3] HAWKINS, D. M., BASAK, S. C. and SHI, X., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **41** (2001) 663-670
- [4] BESALU, E., GIRONES, L. A., and RAMON, C., *Acc. Chem. Res.*, **35** (2002) 289-295
- [5] KATRITZKY, A. R., RACHWAL, P., LAW, K. W., KARELSON, M. and LOBANOV, V., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **36**(4) (1996) 879-884
- [6] KATRITZKY, A. R., SILD, S., LOBANOV, V. and KARELSON, M., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **38** (1998) 300-304

TANYAJAWAB

Rukihati, P3IB - BATAN

Pertanyaan

1. Berapa batasan besar molekul yang dapat dihitung
2. Mengapa dipilih poli(asam akrilat).

Jawaban

1. Batasan molekul yang dihitung tergantung dari metode perhitungan komputasi yang digunakan, seperti Metode Mekanika Molekul untuk 10.000 atom dan Metode Semi Empiris untuk 1.000 atom.
2. Poli(asam akrilat) dan turunannya banyak digunakan untuk coating, adesif dan resin penukar ion sehingga pada penelitian ini digunakan/dipilih poli(asam akrilat).