

## KAJIAN QSPR TEMPERATUR TRANSISI GELAS DAN SIFAT KIMIA FISIK DARI POLIMER TURUNAN POLIETILEN

**Yuniawan Hidayat, Iqmal Tahir, Karna Wijaya, Bambang Setiaji**

*Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry*

*Jurusan Kimia FMIPA UGM Jogjakarta*

Telah dilakukan kajian hubungan kuantitatif struktur-sifat antara temperatur transisi gelas ( $T_g$ ) polimer turunan polietilen dengan sifat-sifat kimia fisiknya. Penelitian dilakukan melalui pemodelan terhadap trimer dari polimer-polimer tersebut dalam bentuk struktur sindiotatik dengan menggunakan pendekatan perhitungan semi empirik metode AM1 (Austin Model 1). Pengkajian dilakukan terhadap prediktor-prediktornya yaitu muatan atom C rantai polimer, polarisabilitas molekul rata-rata ( $\alpha$ ), momen dwi kutub ( $\mu$ ), koefisien partisi ( $\log P$ ), indeks refraksi ( $R_D$ ), berat molekul, volume, luas permukaan, parachor dan kelarutan dalam air ( $\log Sw$ ). Untuk menganalisis hubungan antara  $T_g$  polimer dengan prediktor-prediktor digunakan analisis statistik regresi multilinear.

Dari hasil perhitungan diperoleh persamaan regresi yang menggambarkan hubungan antara  $T_g$  polimer dengan prediktor-prediktornya sebagai berikut :

$$\log T_g = 0,0494 - 1,1560qC_1 - 11,3190qC_2 - 0,0206\alpha - 0,215\mu - 0,5120\log P + 0,0154BM + 0,0204V + 0,3070\log Sw$$

Dengan  $n = 15$ ,  $r = 0,996$ ,  $r^2 = 0,992$ ,  $SD = 0,01381$ ,  $PRESS = 0,00120$ ,  $F_{hitung} = 95,995$ , dan  $F_{hitung}/F_{tabel} = 23,131$ . Uji statistik menunjukkan hubungan linearitas antara  $T_g$  polimer dengan prediktor-prediktornya dapat diterima.

Dengan demikian besarnya  $T_g$  polimer turunan polietilen dipengaruhi oleh muatan atom-atom C dari rantai polimer, polarisabilitas molekul rata-rata, momen dipol,  $\log P$ , berat molekul, volume dari molekul dan kelarutannya dalam air.

**KATA KUNCI :** *QSPR, Temperatur Transisi Gelas*

## PENDAHULUAN

Indonesia memiliki kekayaan alam berlimpah dengan berbagai bahan mentah berupa polimer-polimer alam yang siap diolah menjadi produk polimer siap pakai seperti kayu, lignin, wool dan karet alam. Disamping itu polimer yang disintesis dapat dibuat dengan mengkonversikan fraksi berat dari minyak bumi menjadi bahan polimer. Produk dari suatu polimer sangat terkait dengan pemasokan bahan polimer tersebut untuk industri-industri yang memerlukannya sebagai bahan baku industrinya seperti industri konstruksi bangunan (cat dan pipa), industri kemasan (botol, film, nampan), industri serat kain (poliester, nilon), industri elektronika hingga ke industri otomotif dan pesawat terbang. Dengan demikian industri polimer dapat dipandang sebagai industri dasar yang mencerminkan kemajuan teknologi dan tingkat ekonomi dari sebuah negara industri.

Temperatur transisi gelas ( $T_g$ ) merupakan salah satu sifat fisik penting dari polimer yang menyebabkan polimer tersebut memiliki daya tahan terhadap panas atau suhu yang berbeda-beda. Dimana pada saat temperatur luar mendekati temperatur transisi gelasnya maka suatu polimer mengalami perubahan dari keadaan yang keras kaku menjadi lunak seperti karet (Karelson dkk, 1997). Akibat dari perbedaan  $T_g$  dari setiap polimer menyebabkan setiap polimer memiliki kegunaan yang berbeda-beda bergantung pada suhu lingkungan dimana polimer itu bekerja. Steven (1975) menerangkan bahwa adanya perbedaan  $T_g$  ini disebabkan oleh berbagai faktor yang meliputi panjang molekul polimer, berat molekul polimer, efek elektrostatis seperti polarisabilitas, momen dwi kutub, stereokimia dan stereoregularitas rantai polimer maupun interaksi intermolekuler dari polimer melalui ikatan hidrogen dan gaya london.

Analisis *Quantitative Structure Activity Relationship* (QSAR) menurut Leach (1996) adalah suatu model matematis merumuskan hubungan hubungan antara sifat-sifat kimia fisik dari suatu struktur molekul dengan aktivitas biologinya. Hansch mencontohkan suatu hubungan aktivitas biologi sebagai fungsi dari sifat kimia fisika struktur molekulnya dalam suatu persamaan :

$$\log 1/C = \alpha (\log P)^2 + \beta \log P + \rho\sigma + \delta E_s + \text{Konstanta.}$$

Dalam kajian *Quantitative Structure Properties Relationship* (QSPR), sifat kimia fisik struktur dari suatu molekul bukan merupakan fungsi dari aktivitas biologisnya, namun merupakan fungsi dari suatu perilaku atau sifat-sifat fisik tertentu dari polimer tersebut seperti titik didih, titik lebur, konduktivitas termal dan lain-lain

Keberhasilan dalam menyelesaikan persamaan fungsi gelombang Schrödinger menjadikan berkembang dengan pesatnya berbagai metode perhitungan kuantum menggunakan komputer. Salah satunya adalah perhitungan mekanika kuantum dengan metode semiempirik AM1 (Austin model 1) yang mampu memberikan hasil perhitungan dengan akurat terhadap sifat-sifat kimia fisik dari struktur suatu molekul misalnya memprediksikan sifat elektronik seperti muatan atom, polarizabilitas, momen dwi kutub, koefisien partisi, volume molar, konstanta pergeseran kimia pada NMR yang dapat diterapkan pada sistem non-standar. Pada metode ini digunakan persamaan yang menggambarkan besarnya energi yang timbul antara atom sebagai berikut :

$$E_{AB} = E_{MNDO} + \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \left\{ \sum_i K_{Ai} \exp[-L_{Ai}(R_{AB} - M_{Ai})^2] + \sum_j K_{Bj} \exp[-L_{Bj}(R_{AB} - M_{Bj})^2] \right\}$$

Dalam penelitian ini dikaji hubungan antara temperatur transisi gelas polimer turunan polietilen sebagai variabel tidak bebas dengan deskriptor-deskriptornya yang berupa sifat-sifat kimia fisik seperti muatan bersih atom-atom rantai polimer, polarisabilitas molekul rata-rata ( $\alpha$ ), momen dwi kutub ( $\mu$ ), koefisien partisi ( $\log P$ ), indeks refraksi ( $R_D$ ), berat dan volume molekul, luas permukaan, parachor dan kelarutannya dalam air ( $\log S_w$ ). Deskriptor-deskriptor yang disusun sebagai variabel bebas ini nilainya diperoleh dari hasil perhitungan mekanika kuantum dengan pendekatan metode semi empirik Am1. Untuk menentukan hubungan antara kedua variabel digunakan analisis regresi multilinear. Dari hasil analisis statistik yang dilakukan akan diperoleh informasi mengenai sifat-sifat kimia fisik mana saja yang mempengaruhi besar kecilnya  $T_g$  polimer dan berapa besar pengaruh yang diberikannya.

## METODOLOGI PENELITIAN

### Pemodelan Polimer

Dibuat model trimer dari masing-masing polimer turunan polietilen pada tabel 1 dalam bentuk struktur sindiotatik dengan model ikatan rantai dari kepala ke ekor menggunakan *Polymer Builder* dalam program *Hyperchem* versi 6.01. Kepala dari polimer ditentukan sebagai posisi yang tersubstitusi yang selanjutnya atom C yang tersubstitusi tersebut diberi notasi sebagai C<sub>1</sub>, sedang atom C sebagai ekor polimer diberi notasi C<sub>2</sub>. Pengkajian terhadap polimer dilakukan pada monomer yang terikat oleh dua monomer lainnya. Dengan demikian tambahan pada rantai samping juga memberikan kontribusi perhitungan parameter-parameter elektrostatik pada monomernya. Pemodelan juga dilakukan terhadap monomernya dengan menggunakan program *Toolkit for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compound* versi 1.0 maupun program *Hyperchem* tersebut untuk mendapatkan sifat-sifat kimia fisik lainnya

Tabel 1 Data T<sub>g</sub> secara eksperimen dari polietilen dan turunannya

| No | Jenis Polimer                   | Temperatur T <sub>g</sub> , (°C) |
|----|---------------------------------|----------------------------------|
| 1  | Poli(etilen)                    | 195                              |
| 2  | Poli(propilen)                  | 233                              |
| 3  | Poli(1,1-dimetiletilen)         | 199                              |
| 4  | Poli(etiletilen)                | 228                              |
| 5  | Poli(1-pentena)                 | 220                              |
| 6  | Poli(4-metil-1-pentena)         | 302                              |
| 7  | Poli(butiletilen)               | 220                              |
| 8  | Poli(3,3,3-trifluoropropilen)   | 300                              |
| 9  | Poli(siklopentiletilen)         | 348                              |
| 10 | Poli(3-siklopentil-1-propilena) | 333                              |
| 11 | Poli(sikloheksiletilen)         | 363                              |
| 12 | Poli(klorotrifluoroetilen)      | 373                              |
| 13 | Poli(3-fenil-1-propilena)       | 333                              |
| 14 | Poli(3-sikloheksil-1-propilena) | 348                              |
| 15 | Poli(heptafluoropropiletilen)   | 331                              |

### Optimasi geometri dengan hyperchem

Dilakukan perhitungan optimasi geometri untuk semua model polimer pada program *Hyperchem* menggunakan optimasi geometri MM+ dan dilanjutkan

dengan optimasi semi-empirik AM1. Semua Optimasi geometri di set sebagai berikut :

| Langkah | Metode Perhitungan  | Iterasi | Konvergensi | Algoritma gradien    | Batas RMS kkal/mol |
|---------|---------------------|---------|-------------|----------------------|--------------------|
| 1       | MM+                 | -       | 0,001       | <i>Polak-Ribiere</i> | 0,001              |
| 2       | AM1                 | 150     | 0,001       | <i>Polak-Ribiere</i> | 0,001              |
| 3       | Konvergen           |         |             |                      |                    |
| 4       | <i>Single point</i> |         |             |                      |                    |

### Perhitungan deskriptor QSPR

Dilakukan perhitungan terhadap sifat-sifat kimia fisik polimer sebagaimana tertera pada tabel 2 sebagai berikut

Tabel 2 Sifat-sifat kimia fisik yang dikaji

| No | Simbol    | Deskriptor                              | Satuan         | Cara Perhitungan   |
|----|-----------|---|----------------|--|
| 1  | $qC_1$    | Muatan atom $C_{\text{kepala}}$ polimer | Coloumb        | Semiempirik AM1, Hyperchem Optimasi trimer                         |
| 2  | $qC_2$    | Muatan atom $C_{\text{ekor}}$ polimer   | Coloumb        | Semiempirik AM1, Hyperchem Optimasi trimer                         |
| 3  | $\alpha$  | Polarisabilitas molekul rata-rata       | $\text{\AA}$   | Semi empirik AM1, Hyperchem Optimasi monomer                       |
| 4  | $\mu$     | Momen dwi kutub                         | Debye          | Semiempirik AM1, Hyperchem Optimasi monomer                        |
| 5  | $R_D$     | Indeks refraksi                         | -              | QSAR Properties, Hyperchem Monomer dari trimer teroptimasi         |
| 6  | $\log P$  | Koefisien partisi oktanol-air           | -              | QSAR Properties, Hyperchem Monomer dari trimer teroptimasi         |
| 7  | BM        | Berat Molekul                           | s.m.a          | QSAR Properties, Hyperchem Monomer dari trimer teroptimasi         |
| 8  | V         | Volume                                  | $\text{\AA}^3$ | QSAR Properties, Hyperchem Monomer dari trimer teroptimasi         |
| 9  | A         | Luas Permukaan                          | $\text{\AA}^2$ | QSAR Properties, Hyperchem Monomer dari trimer teroptimasi         |
| 10 | Parachor  | Parachor                                | -              | Toolkit for Estimating Physicochemical Properties Estimasi monomer |
| 11 | $\log Sw$ | Kelarutan dalam air                     | g/100g air     | Toolkit for Estimating Physicochemical Properties Estimasi monomer |

### Analisis regresi multilinear

Model matematis yang menghubungkan antara  $\log T_g$  polimer dengan deskriptor-deskriptornya ditentukan dengan menggunakan analisis regresi multilinear program statistik *SPSS* versi *10.0*. dengan metode *backward*, dalam

tingkat kepercayaan 0.05. Deskriptor-deskriptor diatas digunakan sebagai variabel bebasnya sedangkan  $\log T_g$  polimer sebagai variabel tidak bebas

### **Pengusulan Senyawa Polimer Baru**

Setelah diketahui sifat-sifat kimia fisika sebagai prediktor yang memiliki pengaruh terhadap besarnya temperatur transisi gelas dari polimer turunan polietilen di atas maka berdasarkan parameter tersebut dapat diusulkan beberapa jenis polimer turunan polietilen baru dengan  $T_g$  yang telah ditentukan

## **HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN**

### **Pengumpulan data deskriptor**

Program *Hyperchem* digunakan untuk mengoptimasi geometri dari model trimer yang dibuat. Metode perhitungan digunakan pendekatan semiempirik AM1 Metode ini dipilih karena dari semua metode perhitungan semiempirik metode AM1 merupakan metode yang paling akurat oleh karena terdapatnya koreksi terhadap adanya tolakan antar inti dan pengaruh ikatan hidrogen sehingga hasil perhitungan dapat mendekati harga yang diperoleh melalui eksperimen.

Pengkajian terhadap sifat-sifat kimia fisik sebagai deskriptor yang berupa muatan atom  $qC_1$  dan  $qC_2$ , koefisien partisi ( $\log P$ ), indek refraksi ( $R_D$ ), berat molekul (BM), volume dan luas permukaan molekul polimer dilakukan pada monomer dari trimer yang terikat oleh dua monomer lainnya. Dengan demikian tambahan pada rantai samping juga memberikan kontribusi perhitungan parameter-parameter elektrostatis pada monomernya sehingga deskriptor-deskriptor tersebut tidak bergantung pada berat molekul polimer. Asumsi ini didukung oleh kenyataan bahwa pada umumnya  $T_g$  polimer memberikan nilai yang tetap pada berat molekul diatas 25.000 s.m.a (Karelson, dkk, 1997). Trimer yang dimodelkan merupakan bentuk sindiotaktik mengingat stereoregularitas polimer dalam bentuk ini memberikan energi sterik yang lebih kecil terhadap struktur polimer.

Tabel 3. Rekapitulasi data prediktor dan aktivitas tidak bebas dari polietilen dan turunannya

| No | Jenis polimer                   | Log Tg eksp | Deskriptor-deskriptor |                              |                   |                    |       |              |                |         |                   |          |        |
|----|---------------------------------|-------------|-----------------------|------------------------------|-------------------|--------------------|-------|--------------|----------------|---------|-------------------|----------|--------|
|    |                                 |             | QC<br>(Coloumb)       | qC <sub>2</sub><br>(Coloumb) | $\alpha$<br>(a.u) | $\mu$<br>( Debye ) | log p | BM<br>(sma ) | R <sub>D</sub> | Volume  | Luas<br>permukaan | parachor | Log Sw |
| 1  | Poli(etilen)                    | 2,290       | -0,157                | -0,157                       | 21,937            | 0,000              | 0,793 | 28,054       | 9,202          | 44,902  | 40,213            | 99,000   | -0,620 |
| 2  | Poli(propilen)                  | 2,367       | -0,103                | -0,150                       | 37,078            | 0,230              | 1,123 | 42,081       | 13,751         | 66,261  | 57,085            | 139,000  | -0,420 |
| 3  | Poli(1,1-dimetiletilen)         | 2,299       | -0,038                | -0,140                       | 51,828            | 0,335              | 1,556 | 56,108       | 18,226         | 87,185  | 71,614            | 179,000  | -0,260 |
| 4  | Poli(etiletilen)                | 2,358       | -0,101                | -0,151                       | 52,226            | 0,233              | 1,519 | 56,108       | 18,352         | 88,140  | 77,816            | 179,000  | -0,860 |
| 5  | Poli(1-pentena)                 | 2,342       | -0,097                | -0,149                       | 66,269            | 0,249              | 1,916 | 70,134       | 22,953         | 108,987 | 95,115            | 219,000  | -1,340 |
| 6  | Poli(4-metil-1-pentena)         | 2,480       | -0,103                | -0,151                       | 81,190            | 0,223              | 2,246 | 84,161       | 27,501         | 130,984 | 118,786           | 259,000  | -1,630 |
| 7  | Poli(butiletilen)               | 2,342       | -0,107                | -0,152                       | 81,920            | 0,251              | 2,312 | 84,161       | 27,554         | 129,719 | 116,192           | 259,000  | -1,830 |
| 8  | Poli(3,3,3-trifluoropropilen)   | 2,477       | -0,125                | -0,171                       | 39,091            | 2,772              | 1,462 | 96,052       | 14,609         | 74,279  | 70,336            | 156,400  | -1,590 |
| 9  | Poli(siklopentiletilen)         | 2,542       | -0,093                | -0,153                       | 93,714            | 0,202              | 2,139 | 96,172       | 30,300         | 139,121 | 115,091           | 268,900  | -1,960 |
| 10 | Poli(3-siklopentil-1-propilena) | 2,522       | -0,098                | -0,152                       | 109,367           | 0,222              | 2,535 | 110,199      | 34,901         | 162,049 | 137,748           | 308,600  | -2,470 |
| 11 | Poli(sikloheksiletilen)         | 2,560       | -0,096                | -0,159                       | 110,763           | 0,234              | 2,535 | 110,199      | 34,901         | 159,973 | 129,846           | 308,600  | -2,350 |
| 12 | Poli(klorotrifluoroetilen)      | 2,572       | 0,234                 | 0,051                        | 32,982            | 0,678              | 2,012 | 116,470      | 14,255         | 171,136 | 67,624            | 153,700  | -0,200 |
| 13 | Poli(3-fenil-1-propilena)       | 2,522       | -0,095                | -0,156                       | 106,155           | 0,184              | 2,737 | 118,178      | 38,447         | 156,765 | 136,369           | 314,400  | -2,540 |
| 14 | Poli(3-sikloheksil-1-propilena) | 2,542       | -0,103                | -0,152                       | 124,637           | 0,218              | 2,931 | 124,226      | 39,502         | 182,733 | 157,415           | 348,600  | -2,870 |
| 15 | Poli(heptafluoropropiletilen)   | 2,520       | -0,120                | -0,175                       | 80,006            | 3,175              | 3,036 | 196,068      | 24,151         | 128,928 | 125,212           | 259,600  | -4,640 |

Tabel 4. Regresi dari parameter-parameter terpilih dari polietilen dan turunannya

|    | Model regresi | $\beta$ | qC1    | qC2     | $\alpha$ | $\mu$  | log p  | BM    | Refraktivitas | Volume | Luas permukaan | parachor | Log Sw | r     | SD    |
|----|---------------|---------|--------|---------|----------|--------|--------|-------|---------------|--------|----------------|----------|--------|-------|-------|
| 1  | Model 1       | 0,072   | -1,435 | -10,887 | -0,020   | -0,230 | -0,543 | 0,017 | -0,004        | 0,020  | 0,001          | ---      | 0,346  | 0,997 | 0,015 |
| 2  | Model 2       | 0,036   | -1,795 | -10,749 | -0,019   | -0,226 | -0,488 | 0,017 | -0,004        | 0,020  | ---            | ---      | 0,366  | 0,997 | 0,014 |
| 3  | Model 3       | 0,049   | -1,156 | -11,319 | -0,021   | -0,215 | -0,512 | 0,015 | ---           | 0,020  | ---            | ---      | 0,307  | 0,996 | 0,014 |
| 4  | Model 4       | 1,502   | -5,086 | 0,956   | ---      | -0,140 | -0,296 | 0,019 | -0,008        | 0,005  | 0,001          | ---      | 0,510  | 0,989 | 0,026 |
| 5  | Model 5       | 1,474   | -5,183 | 0,886   | ---      | -0,140 | -0,278 | 0,019 | -0,008        | 0,005  | ---            | ---      | 0,515  | 0,989 | 0,024 |
| 6  | Model 6       | 2,215   | -2,797 | 2,688   | 0,003    | ---    | -0,272 | 0,009 | 0,004         | 0,002  | 0,000          | ---      | 0,217  | 0,972 | 0,040 |
| 7  | Model 7       | 2,220   | -2,774 | 2,693   | 0,003    | ---    | -0,276 | 0,009 | 0,004         | 0,002  | ---            | ---      | 0,215  | 0,972 | 0,037 |
| 8  | Model 8       | 2,349   | -3,387 | 4,056   | 0,005    | ---    | -0,249 | 0,010 | 0,003         | ---    | ---            | ---      | 0,257  | 0,972 | 0,034 |
| 9  | Model 9       | 2,345   | -3,590 | 4,237   | 0,006    | ---    | -0,236 | 0,010 | ---           | ---    | ---            | ---      | 0,274  | 0,971 | 0,032 |
| 10 | Model 10      | 0,055   | -0,914 | -11,608 | -0,021   | -0,223 | -0,550 | 0,016 | ---           | 0,020  | 0,002          | -0,001   | 0,307  | 0,977 | 0,016 |
| 11 | Model 11      | 0,090   | -0,830 | -11,392 | -0,021   | -0,221 | -0,573 | 0,016 | ---           | 0,020  | 0,002          | ---      | 0,293  | 0,977 | 0,014 |
| 12 | Model 12      | 1,442   | -5,051 | 3,656   | -0,019   | -0,216 | -0,930 | 0,023 | -0,035        | ---    | -0,006         | 0,020    | 0,429  | 0,996 | 0,016 |
| 13 | Model 13      | 1,610   | -4,189 | 2,724   | -0,013   | -0,194 | -0,839 | 0,021 | -0,023        | ---    | ---            | 0,013    | 0,404  | 0,993 | 0,020 |
| 14 | Model 14      | 1,855   | -5,634 | 4,224   | ---      | -0,138 | -0,421 | 0,021 | -0,014        | ---    | ---            | 0,004    | 0,512  | 0,988 | 0,024 |
| 15 | Model 15      | 2,043   | -4,399 | 3,744   | ---      | -0,089 | -0,374 | 0,016 | ---           | ---    | ---            | 0,002    | 0,385  | 0,983 | 0,027 |
| 16 | Model 16      | 0,357   | -2,027 | -7,736  | -0,021   | -0,237 | -0,706 | 0,019 | -0,013        | 0,015  | ---            | 0,006    | 0,348  | 0,998 | 0,012 |



Tabel. 5. Model persamaan regresi terpilih dari analisis multilinear polimer polietilen dan turunannya

| No | Model Variabel   | $r^2$ | PRESS | F       | $\frac{F_{pred}}{F_{tabel}}$ |
|----|--|-------|-------|---------|------------------------------|
| 1  | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, R_D, V, A, \log Sw$    | 0,994 | 0,065 | 69,489  | 11,659                       |
| 2  | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, R_D, V, \log Sw$       | 0,994 | 0,001 | 85,373  | 17,898                       |
| 3  | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, V, \log Sw$            | 0,992 | 0,001 | 95,995  | 23,131                       |
| 4  | $qC_1, qC_2, \mu, \log P, BM, R_D, V, A, \log Sw$            | 0,977 | 0,004 | 23,887  | 5,008                        |
| 5  | $qC_1, qC_2, \mu, \log P, BM, R_D, V, \log Sw$               | 0,977 | 0,003 | 32,102  | 7,735                        |
| 6  | $qC_1, qC_2, \alpha, \log P, BM, R_D, V, A, \log Sw$         | 0,945 | 0,008 | 9,490   | 1,990                        |
| 7  | $qC_1, qC_2, \alpha, \log P, BM, R_D, V, \log Sw$            | 0,945 | 0,008 | 12,811  | 3,087                        |
| 8  | $qC_1, qC_2, \alpha, \log P, BM, V, \log Sw$                 | 0,944 | 0,009 | 16,953  | 4,473                        |
| 9  | $qC_1, qC_2, \alpha, \log P, BM, \log Sw$                    | 0,943 | 0,643 | 22,228  | 6,209                        |
| 10 | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, V, A, \rho, \log Sw$   | 0,993 | 0,109 | 60,534  | 10,157                       |
| 11 | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, V, A, \log Sw$         | 0,993 | 0,001 | 82,960  | 17,392                       |
| 12 | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, R_D, A, \rho, \log Sw$ | 0,993 | 0,050 | 55,032  | 9,234                        |
| 13 | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, R_D, \rho, \log Sw$    | 0,987 | 0,010 | 41,365  | 8,672                        |
| 14 | $qC_1, qC_2, \mu, \log P, BM, R_D, \rho, \log Sw$            | 0,977 | 0,149 | 31,428  | 7,573                        |
| 15 | $qC_1, qC_2, \mu, \log P, BM, \rho, \log Sw$                 | 0,966 | 0,206 | 28,459  | 7,509                        |
| 16 | $qC_1, qC_2, \alpha, \mu, \log P, BM, R_D, V, \rho, \log Sw$ | 0,996 | 0,009 | 107,484 | 18,034                       |

Data pemodelan terhadap monomernya digunakan untuk menghitung polarisabilitas molekul rata-rata ( $\alpha$ ), momen dwi kutub ( $\mu$ ). Deskriptor lainnya yaitu parachor dan kelarutan dalam air ( $\log Sw$ ) diperoleh dari hasil estimasi monomer-monomernya menggunakan program *Toolkit for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compound*. Data hasil perhitungan secara lengkap disajikan pada tabel 3.

### Analisis regresi multilinear

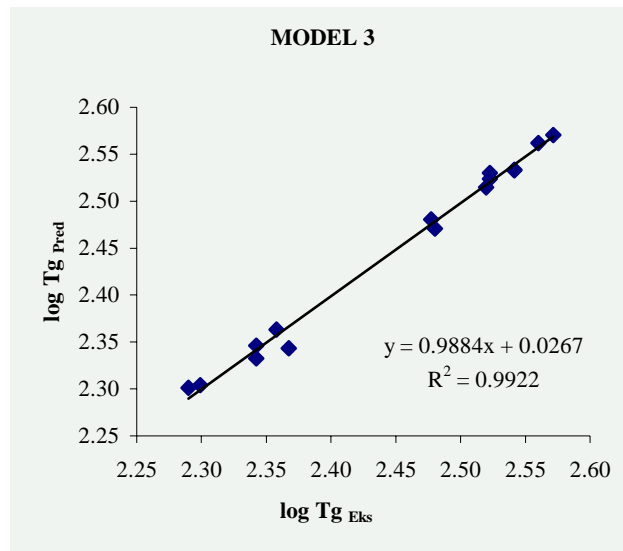
Analisis regresi multivariabel adalah sebuah teknik statistik untuk menyelidiki dan memodelkan hubungan antara suatu variabel tidak bebas dengan lebih dari satu variabel bebas oleh karena itu untuk mengetahui hubungan antara  $T_g$  polimer turunan polietilen dengan deskriptor-deskriptornya maka dilakukan analisis regresi multilinear. Pada analisis regresi ini  $\log T_g$  digunakan sebagai variabel tidak bebasnya, sedangkan deskriptor-deskriptor dari hasil perhitungan

komputer digunakan sebagai variabel-variabel bebasnya. Pada tabel 4 dan tabel 5 disajikan secara lengkap analisis regresi parsial dari deskriptor-deskriptornya dan berbagai model persamaan regresi yang terpilih.

Serangkaian uji statistik menunjukkan bahwa model regresi yang ke-3 layak dipilih sebagai model regresi yang paling baik. Pemilihan regresi model 3 ini didukung oleh bukti-bukti dari hasil uji statistik yaitu harga korelasi  $r^2 = 0,992$ ,  $SD = 0,01381$ , memiliki nilai signifikansi yang tertinggi  $F_{hitung} = 95,559$ ,  $F_{hitung}/F_{tabel} = 23,131$  dan nilai PRESS (*Prediction Sum of Square*) yang terendah 0,00120. Dari hasil uji statistik tersebut dan berdasarkan regresi model 3 maka dapat dirumuskan suatu hubungan antara log Tg polimer turunan polietilen dengan sifat kimia fisik dari strukturnya sebagai berikut :

$$\log Tg = 0,0494 - 1,1560qC_1 - 11,3190qC_2 - 0,0206\alpha - 0,215\mu - 0,5120\log P + 0,0154BM + 0,0204V + 0,3070\log Sw$$

Adapun grafik regresi yang mengilustrasikan hubungan antara log Tg eksperimen dengan log Tg prediksi adalah sebagai berikut



Gambar 1 Grafik antara log Tg eksperimen vs log Tg prediksi untuk seri polimer polietilen dan turunannya

### Sifat kima-fisik yang mempengaruhi Tg polimer

Dari hasil regresi multilinear diatas maka terdapat delapan variabel yang memiliki korelasi terhadap besarnya temperatur transisi gelas polimer turunan

polietilen yaitu muatan atom  $qC_1$ , muatan atom  $qC_2$ , polarisabilitas rata-rata molekul ( $\alpha$ ), momen dwi kutub ( $\mu$ ), koefisien partisi etanol-air ( $\log P$ ), berat molekul (BM). Semua deskriptor tersebut memberikan pengaruh berbeda-beda terhadap nilai  $\log T_g$  polimer dengan besar sesuai dengan koefisien regresi masing-masing deskriptor.

### Strategi desain polimer

Setelah diketahui faktor-faktor dari sifat-sifat kimia fisik polimer yang mempengaruhi besar kecilnya  $T_g$  polimer tersebut maka dapat digunakan untuk merancang polimer turunan polietilen baru yang memiliki  $T_g$  sesuai dengan yang diharapkan. Pada penelitian ini dicoba dirancang suatu polimer turunan poli etilen yang memiliki  $T_g$  lebih tinggi dari  $T_g$  turunan polietilen hasil eksperimen yang telah ada. Dengan mengacu pada data tabel 1 dimana  $T_g$  tertingginya yaitu sebesar 373 K. Melalui langkah-langkah perhitungan yang sama diperoleh beberapa rancangan polimer turunan polietilen seperti pada tabel 6.

### KESIMPULAN

1. Hubungan antara  $\log T_g$  polimer turunan polietilen dengan sifat kimia fisiknya dirumuskan sebagai :

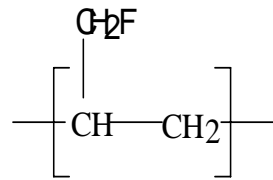
$$\begin{aligned} \text{Log } T_g = & 0,0494 - 1,1560qC_1 - 11,3190qC_2 - 0,0206\alpha - 0,215\mu - 0,5120\log P \\ & + 0,0154BM + 0,0204V + 0,3070\log Sw \end{aligned}$$

Dengan  $n = 15$ ,  $r = 0,996$ ,  $r^2 = 0,992$ ,  $SD = 0,01381$ ,  $PRESS = 0,00120$ ,  $F_{hitung} = 95,995$ , dan  $F_{hitung}/F_{tabel} = 23,131$ .

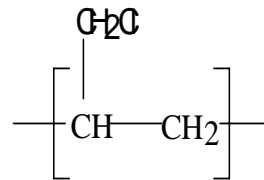
2. Sifat-sifat kimia fisik yang mempengaruhi besar temperatur transisi gelas polimer turunan polietilen adalah muatan atom rantai polimer ( $qC_1$  dan  $qC_2$ ), polarisabilitas rata-rata molekul ( $\alpha$ ), momen dwi kutub ( $\mu$ ), koefisien partisi etanol-air ( $\log P$ ), berat molekul (BM), Volume molekul, dan kelarutan dalam air  $\log (Sw)$
3. Berdasarkan persamaan QSPR yang diperoleh maka dapat dirancang polimer turunan polietilen baru yang memiliki Temperatur transisi gelas sesuai dengan yang diharapkan

Tabel 6. Model polimer baru yang diusulkan

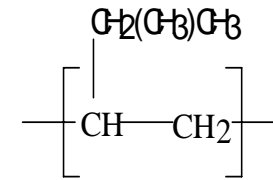
| No | Nama polimer        | QC <sub>1</sub> | qC <sub>2</sub> | α      | μ     | log P | BM     | Volume  | log Sw | log Tg | Tg      |
|----|---------------------|-----------------|-----------------|--------|-------|-------|--------|---------|--------|--------|---------|
| 1  | 3-fluoro-1-propilen | -0,138          | -0,153          | 38,038 | 1,659 | 0,652 | 60,071 | 69,337  | -0,690 | 2,595  | 393,886 |
| 2  | 3-kloro-1-propilen  | -0,111          | -0,157          | 43,702 | 1,592 | 1,195 | 76,526 | 78,026  | -0,560 | 2,692  | 492,539 |
| 3  | 3-metil-1-butilen   | -0,096          | -0,154          | 66,777 | 0,195 | 1,850 | 70,134 | 108,826 | -1,340 | 2,419  | 262,665 |
| 4  | 4-fluoro-1-butilen  | -0,098          | -0,154          | 53,279 | 1,568 | 0,976 | 74,098 | 90,666  | -1,170 | 2,597  | 395,356 |
| 5  | 4-kloro-1-butilen   | -0,101          | -0,154          | 59,239 | 1,540 | 1,519 | 90,553 | 101,883 | -1,060 | 2,722  | 526,893 |
| 6  | 5-metil-1-heksena   | -0,103          | -0,153          | 95,941 | 0,230 | 2,264 | 98,188 | 151,632 | -2,140 | 2,665  | 462,491 |



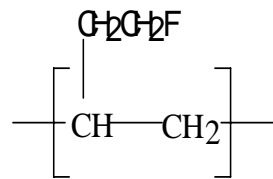
3-fluoro-1-propilen



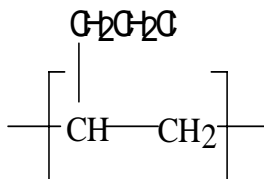
3-kloro-1-propilen



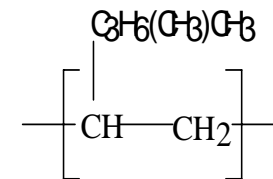
3-metil-1-butilen



4-fluoro-1-butilen



4-kloro-1-butilen



5-metil-1-heksena

## DAFTAR PUSTAKA

- Karelson, M., Katritzky, A.L., Lobanov, V. and Sild, S., 1997, Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) Correlation of Glass Transition Temperature of High Molecular Weight Polymers, *J. Chem. Inform. Comp. Sci.*, 98, 300-304
- Leach, A.R., 1996, *Molecular Modeling : Principles and Applications*, Addison-Longman, London
- Stevens, M.P., 1975, *Polymer Chemisry : An Introduction*, Addison-Wesley Company Inc, New York