

ANALISIS MULTIVARIAT : HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR MOLEKUL DAN TITIK DIDIH 447 SENYAWA ORGANIK

Muzakky Yapin, M. Utoro Yahya, Karna Wijaya dan Iqmal Tahir

Austrian-Indonesian Centre for Computational Chemistry (AIC), Jurusan Kimia, Universitas Gadjah Mada, Sekip Utara, Jogjakarta, 55281.

INTISARI

Telah dilakukan pengkajian Hubungan Kuantitatif Struktur-Sifat (HKSS) dari beberapa senyawa organik menggunakan deskriptor fragmental. Data titik didih, titik leleh dan kerapatan diperoleh dari *CRC Hand Book of Chemistry and Physics* edisi 81. Deskriptor fragmental setiap senyawa dijabarkan dalam bentuk jenis atom dan tipe ikatan masing-masing atom. Pengkajian dilakukan berupa nilai titik didih (dalam K) sebagai fungsi linear dari seluruh deskriptor. Pemilihan model persamaan terbaik ditentukan dari analisis regresi multilinear. Model alternatif persamaan HKSS terbaik untuk titik didih (K) menunjukkan bahwa titik didih (K) berhubungan secara linear dengan: $n(H)$, $n(C_{\text{sek alf}})$, $n(C_{\text{ter sik}})$, $n(C_{\text{ter arm}})$, $n(O)$, $n(F)$, $n(C-C_{\text{alf}})$, $n(C=C_{\text{arm}})$, $n(C_1=C_2)$, $n(C_2=C_3)$, $n(C_3=C_4)$, $n(C_4=C_5)$, $n(C_5=C_6)$, $n(C_1\equiv C_2)$, $n(C_2\equiv C_3)$, $n(C_3\equiv C_4)$, $n(C_4\equiv C_5)$, $n(C_5\equiv C_6)$, $n(C_6\equiv C_7)$, $n(C-O)$, $n(C-S)$, $n(C-Cl)$, $n(C=O)$, $n(O-H)$, $n(N-H)$, $n(S-H)$, (BM) , $(BM)_{\text{kdr}}$, $n(C_{\text{prim}})_{\text{kdr}}$, $n(C_{\text{sek}})_{\text{kdr}}$, $n(C-C_{\text{alf}})_{\text{kdr}}$, $n(C-H)_{\text{kdr}}$, $n(HXBM)$, $n(C_{\text{prim}} X BM)$, dengan parameter statistik: $n = 447$, $r = 0,992$, $SD = 13,014$ dan $F_{\text{hitung}} = 764,121$.

ABSTRACT

The Quantitative Structure-Property Relationships (QSPR) of organic compounds using fragmental descriptor have been studied. Experiment values of the bp, mp, and density were collected from the *CRC Hand Book of Chemistry and Physic 81st*. Fragmental description of every compound is explained in the form of atom and it's bonding types. The study was made in the form of bp (K), mp (K) and density as the linear function of all descriptor. The best equation model was determined by regression multilinear analysis. *The alternative model of the best QSPR equation for boiling point showed that boiling point linearly correlated with: $n(H)$, $n(C_{\text{sek alf}})$, $n(C_{\text{ter sik}})$, $n(C_{\text{ter arm}})$, $n(O)$, $n(F)$, $n(C-C_{\text{alf}})$, $n(C=C_{\text{arm}})$, $n(C_1=C_2)$, $n(C_2=C_3)$, $n(C_3=C_4)$, $n(C_4=C_5)$, $n(C_5=C_6)$, $n(C_1\equiv C_2)$, $n(C_2\equiv C_3)$, $n(C_3\equiv C_4)$, $n(C_4\equiv C_5)$, $n(C_5\equiv C_6)$, $n(C_6\equiv C_7)$, $n(C-O)$, $n(C-S)$, $n(C-Cl)$, $n(C=O)$, $n(O-H)$, $n(N-H)$, $n(S-H)$, (BM) , $(BM)_{\text{kdr}}$, $n(C_{\text{prim}})_{\text{kdr}}$, $n(C_{\text{sek}})_{\text{kdr}}$, $n(C-C_{\text{alf}})_{\text{kdr}}$, $n(C-H)_{\text{kdr}}$, $n(HXBM)$, $n(C_{\text{prim}} X BM)$, with statistical parameters: $n = 447$, $r = 0.992$, $SD = 13.014$ and $F_{\text{count}} = 764.121$, respectively.*

PENDAHULUAN

Kimia komputasi merupakan studi kimia yang berbasis teoritik dan diarahkan untuk pengembangan metode-metode perhitungan serta konsep-konsep teoritik untuk menerangkan fenomena-fenomena eksperimental. Berkembangnya kimia komputasi terutama pada kaitannya dengan perhitungan kimia kuantum dan berbagai terapan untuk bidang ilmu lainnya. Selain itu kimia komputasi ternyata dapat memberikan peranan dalam hal membantu pemodelan molekuler mendahului kajian yang dilakukan secara eksperimental. Penelitian-penelitian tersebut berkembang sebagai suatu terapan penelitian kimia komputasi yakni berupa kegiatan penelitian konsep-konsep kimia komputasi untuk berbagai tujuan khususnya dalam skala molekuler. Hal ini cukup membantu para ahli kimia eksperimental dan para pengguna ilmu kimia lainnya dalam melakukan kegiatan penelitian, selain itu membantu menghemat waktu, biaya yang harus dikeluarkan dibandingkan apabila langsung dilakukan eksperimen. Telah banyak bidang yang menggunakan aplikasi kimia komputasi diantaranya adalah QSPR (*Quantitative Structure-Property Relationship*). Menurut Brasquet *et al.* (1999) bahwa QSPR secara umum digunakan untuk hubungan biologikal, sifat-sifat fisika atau kimia pada senyawa dengan karakteristik fisikokimianya. Beberapa peneliti lain juga telah mengkaji hubungan antara titik didih dengan berbagai deskriptor pada berbagai senyawa (Basak, *et al.* 1996; Balaban, *et al.* 1992^a; Balaban, *et al.* 1992^b; Katritzky dan Labanov; 1988; Katritzky, *et al.* 1996; Le, *et al.*, 1995; Stanton, *et al.* 1992; Zaman, *et al.*, 1998)

Pada prinsipnya formula struktur sebuah senyawa berisikan kode yang seluruhnya mengandung informasi perhitungan-perhitungan kimia, biologikal, dan sifat fisiknya. Formula struktural menetapkan dengan tepat seluruh sifat dan ciri-ciri molekul, seperti sifat fisik. Melihat kenyataan tersebut maka dapat dipahami banyak faktor yang mempengaruhi sifat fisik senyawa. Beberapa faktor yang berpengaruh adalah (i) keragaman unsur penyusun senyawa, misalnya jumlah atom H, C, O, dan lain-lain. (ii) adanya ikatan tunggal, rangkap dua, rangkap tiga, (iii) Berat molekul (iv) bentuk ortho, meta, dan para, dan lain-lain. Ada dua alternatif pendekatan terhadap test random Edisonian untuk senyawa-senyawa dasar dalam sifat-sifat superior. Alternatif pertama terdiri dari suatu perhitungan teoritikal yang

menggunakan mekanika kuantum dan mekanika statistik. Alternatif kedua adalah *Quantitative Structure-Activity Relationship/Quantitative Structure-Property Relationship* (QSAR/QSPR). Studi QSAR/QSPR didasarkan pada hubungan matematik antara aktivitas atau sifat dibawah penelitian dengan satu atau beberapa parameter deskriptif (deskriptor) yang dihubungkan pada struktur molekul. Dengan deskriptor-deskriptor yang didapatkan dari sifat eksperimental senyawa, maka diberikan beberapa hubungan yang diturunkan untuk prediksi aktivitas atau sifat senyawa yang tersedia. Apabila sebuah model dapat didirikan, maka model tersebut dapat dipakai sebagai pedoman sintesis kimia dalam pilihan alternatif struktur hipotetis. Pada dasarnya studi QSAR/QSPR dapat menjelaskan mekanisme sifat yang dihubungkan dengan struktur molekul. Estimasi titik didih telah banyak dilaporkan, dan estimasi yang telah dikerjakan merupakan penelitian QSPR yang kebanyakan menggunakan deskriptor geometrik molekul dan molekul elektronik. Sedangkan estimasi yang menggunakan deskriptor tanpa geometri molekuler dan molekuler elektronik hanya ada pada laporan Terry S. Carlton untuk prediksi titik didih senyawa etana dan 52 senyawa kloroflouroetana (Carlton, 1998). Pada penelitian ini dikaji hubungan antara struktur molekul 447 senyawa organik dengan titik didih, yang meggunakan teknik analisis kuantitatif berupa metode analisis multivariate pada regresi multilinier yang diaplikasikan pada pemodelan dan perkiraan dari 447 senyawa organik. Struktur senyawa yang dipelajari ditinjau dari deskriptor-deskriptor fragmental.

Dasar matematika pada hubungan kuantitatif struktur-sifat mengandalkan pada polilinieritas (PPL). Perhitungan pada PPL, dilakukan secara terus menerus dan tergantung antara nilai eksperimental dengan beberapa faktor intrinsik struktur molekul, X_j , diasumsikan linear dalam bidang tertentu pada faktor ini, $\{x_j\}$. Asumsi ini dapat valid atau invalid, tergantung pada faktor fungsional dari ketergantungan $P_i(x_j)$ disekitar titik X_j . Pada saat PPL valid, sifat eksperimen tergantung secara linier pada beberapa faktor struktural X_j dan regresi multi parameter yang dapat didirikan dengan menggunakan metode kuadrat terkecil linier, dengan persamaan sebagai berikut :

$$P_i = a_{0i} + a_{1i}X_1 + a_{2i}X_2 + a_{3i}X_3.....(1.1)$$

Pada penelitian ini, P_i merupakan harga titik didih eksperimen yang merupakan variabel tidak bebas, sedangkan X_1 , X_2 , X_3 merupakan variabel bebas yang berupa deskriptor fragmentasi.

Pada studi kali ini, regresi yang digunakan terdapat dalam program komputer yaitu *SPSS for Windows release 10.0* dengan metode yang digunakan adalah *Backward*. Program SPSS ini merupakan program komputer yang dapat digunakan untuk perhitungan data yang memerlukan statistik secara tepat.

METODOLOGI PENELITIAN

Obyek Penelitian

Data struktur molekul, titik didih 447 senyawa organik diperoleh dari Lide (2000), yang meliputi senyawa :

- | | |
|--|---------------------------------------|
| 1. Alkana alifatis 119 senyawa | 10. Alkana Siklik sebanyak 55 senyawa |
| 2. Alkena sebanyak 27 senyawa | 11. Alkuna sebanyak 31 senyawa |
| 3. Alkohol sebanyak 13 senyawa | 12. Eter sebanyak 11 senyawa |
| 4. Alkanal sebanyak 6 senyawa | 13. Keton sebanyak 20 senyawa |
| 5. Asam Karboksilat sebanyak 8 senyawa | 14. Ester sebanyak 49 senyawa |
| 6. Benzena sebanyak 29 senyawa | 15. Alkil Benzena sebanyak 16 senyawa |
| 7. Anilin sebanyak 19 senyawa | 16. Halo Benzena sebanyak 23 senyawa |
| 8. Benzenadiol sebanyak 4 senyawa | 17. Benzenatiol sebanyak 13 senyawa |
| 9. Polisiklik Hidrokarbon sebanyak 4 senyawa | |

Peralatan

Pada penelitian ini peralatan lunak yang digunakan adalah perangkat lunak statistik paket program *SPSS for Windows release 10.0* digunakan untuk menjalankan program statistik. Perangkat lunak digunakan untuk riset tersedia dalam jaringan komputer Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria. Penulisan program dan pekerjaan perhitungan dilakukan dengan workstation PC AIC 53 Pentium 4 CPU berkapasitas 128.0 MB RAM.

Prosedur Penelitian

Data eksperimen senyawa-senyawa organik diambil dari buku CRC Handbook of Chemistry and Physics edisi 81 tahun 2000-2001 (Lide, 2000). Dari data yang ada pengumpulannya dimulai dari rumus molekul dan namanya pada indeks formula molekul. Kemudian ditulis struktur molekulnya pada formula struktural dan nilai titik didih dari konstanta fisika senyawa organik

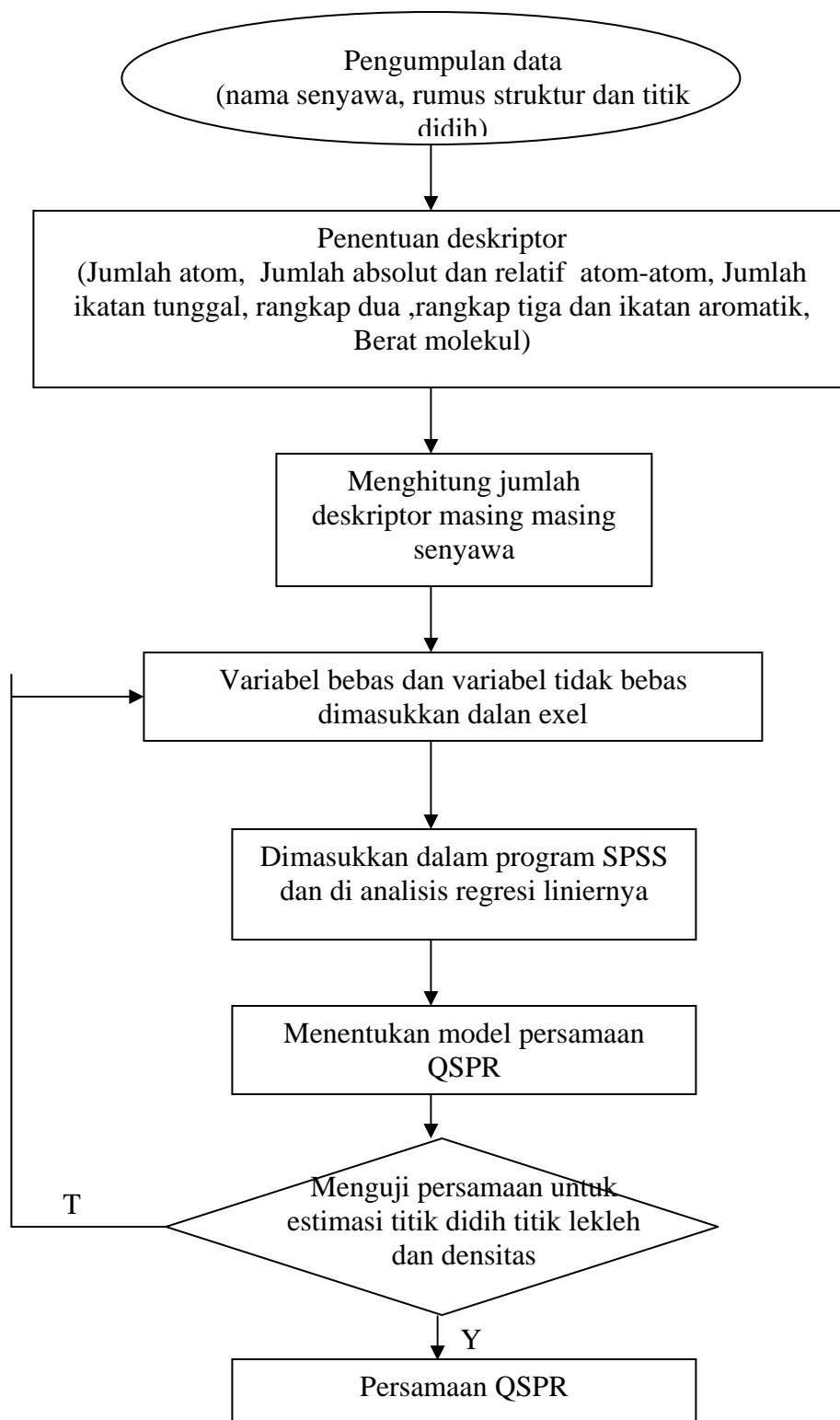
Analisis deskriptor

Pada penelitian ini deskriptor yang digunakan adalah deskriptor frakmental yang meliputi (a) Jumlah absolut dan relatif atom-atom : H, C, O, N, S, F, Cl, Br, I; (b) Jumlah ikatan tunggal, rangkap dua, rangkap tiga dan ikatan aromatik dan (c) Berat molekul. Tiap-tiap struktur senyawa yang digunakan pada penelitian ini dihitung jumlah masing-masing deskriptor. Data deskriptor yang dihasilkan dituliskan dalam program Excel (terdiri dari : rumus molekul, nama senyawa, deskriptor-deskriptor, dan titik didih)

Analisis Statistik

Pada kajian HKSS, banyak metode statistik multivariat yang dapat digunakan dan memberikan hasil analisis yang memuaskan. Metode dasar yang paling populer adalah analisis regresi, yang digunakan disini adalah hubungan linier dengan tahap sebagai berikut (1) Data yang telah dimasukkan kemudian dikopi ke program SPSS; (2) Analisis regresi linier; (3) Memasukkan variabel bebas (deskriptor) dan variabel terikat (titik didih); dan (4) Analisis regresi linier menggunakan metode Backward

Diagram Prosedur Penelitian



HASIL DAN PEMBAHASAN

Kumpulan Data dan Deskriptor

Data senyawa organik yang diteliti sebanyak 447 senyawa yang mengandung O, N, F, Cl, Br, I, S, dan berstruktur E, Z, ortho meta, dan para, kumpulan data ini mempunyai jumlah yang signifikan. 447 kelompok senyawa merupakan representatif untuk seluruh kelompok mayor senyawa organik yang mengandung C, H, O, N, S, F, Cl, Br, dan I. Seluruh struktur digambarkan dan hitung berapa jumlah deskriptor frekmentasinya. Deskriptor-deskriptor tersebut dimasukkan dalam program excel dan diberi tanda seperti dalam tabel 1.

Tabel 1. Arti deskriptor

No.	Deskriptor	Arti Deskriptor	No.	Deskriptor	Arti Deskriptor
1	n(H)	Jumlah atom H	26	n(C ₅ =C ₆)	Jumlah ikatan rangkap tiga C≡C
2	n(C _{prim})	Jumlah atom C primer	27	n(C ₆ ≡C ₇)	Jumlah ikatan rangkap tiga C≡C
3	n(C _{sek alif})	Jumlah atom C sekunder alifatik	28	n(C-O)	Jumlah ikatan C-O
4	n(C _{ter alif})	Jumlah atom C tersier alifatik	29	n(C-N)	Jumlah ikatan C-N
5	n(C _{kwat})	Jumlah atom C kwarter	30	n(C-S)	Jumlah ikatan C-S
6	n(C _{sek sik})	Jumlah atom C sekunder siklik	31	n(C-Cl)	Jumlah ikatan C-Cl
7	n(C _{ter sik})	Jumlah atom C tersier siklik	32	n(C-Br)	Jumlah ikatan C-Br
8	n(C _{sek arm})	Jumlah atom C sekunder aromatik	33	n(C-I)	Jumlah ikatan C-I
9	n(C _{ter arm})	Jumlah atom C tersier aromatik	34	n(C=O)	Jumlah ikatan C=O
10	n(O)	Jumlah atom O	35	n(O-H)	Jumlah ikatan O-H
11	n(F)	Jumlah atom F	36	n(N-H)	Jumlah ikatan N-H
12	n(Cl)	Jumlah atom Cl	37	n(S-H)	Jumlah ikatan S-H
13	n(C-C _{alif})	Jumlah ikatan rangkap C-C alifatik	38	n(E)	Jumlah senyawa yang berstruktur E
14	n(C-C _{sik})	Jumlah ikatan rangkap C-C siklik	39	n(Z)	Jumlah senyawa yang berstruktur Z
15	n(C-C _{arm})	Jumlah ikatan rangkap C-C aromatik	40	n(ortho)	Jumlah senyawa yang berstruktur ortho
16	n(C=C _{arm})	Jumlah ikatan rangkap C=C aromatik	41	n(meta)	Jumlah senyawa yang berstruktur meta
17	n(C ₁ =C ₂)	Jumlah ikatan rangkap C=C	42	n(para)	Jumlah senyawa yang berstruktur para
18	n(C ₂ =C ₃)	Jumlah ikatan rangkap C=C	43	n(BM)	Berat molekul
19	n(C ₃ =C ₄)	Jumlah ikatan rangkap C=C	44	n(BM _{sqr})	Berat molekul kwadrat
20	n(C ₄ =C ₅)	Jumlah ikatan rangkap C=C	45	n(C _{prim sqr})	Jumlah atom C sekunder kwadrat
21	n(C ₅ =C ₆)	Jumlah ikatan rangkap C=C	46	n(C _{sek sqr})	Jumlah atom C primer kwadrat
22	n(C ₁ ≡C ₂)	Jumlah ikatan rangkap tiga C≡C	47	n(C-C _{alif sqr})	Jumlah ikatan C-C alifatik kwadrat
23	n(C ₂ ≡C ₃)	Jumlah ikatan rangkap tiga C≡C	48	n(C-H _{sqr})	Jumlah ikatan C-H kwadrat
24	n(C ₃ ≡C ₄)	Jumlah ikatan rangkap tiga C≡C	49	n(HXBM)	Jumlah atom H kali berat molekul
25	n(C ₄ ≡C ₅)	Jumlah ikatan rangkap tiga C≡C	50	n(C _{prim X BM})	Jumlah atom C primer kali berat molekul

Deskriptor Titik Didih

Hasil perhitungan deskriptor didapatkan jumlah masing-masing descriptor. Seluruh deskriptor dianalisis menggunakan regresi multi linier yang dihubungkan dengan titik didih. Dari 50 deskriptor yang ada yang berpengaruh terhadap titik didih sebanyak 34 seperti disajikan dalam tabel 2.

Tabel 2. Deskriptor titik didih dan koefisiennya.

No.	Deskriptor	Parameter	Std. Error
	intersep	169.975	4.407
1	n(H)	4.073	0.638
2	n(C _{sek alf})	5.431	1.013
3	n(C _{ter sik})	5.845	3.044
4	n(C _{ter arm})	13.431	1.342
5	n(O)	30.312	9.361
6	n(F)	-27.698	4.758
7	n(C-Calf)	-10.47	1.321
8	n(C=C _{arm})	7.474	0.369
9	n(C ₁ =C ₂)	27.958	5.499
10	n(C ₂ =C ₃)	18.656	4.983
11	n(C ₃ =C ₄)	15.324	5.282
12	n(C ₄ =C ₅)	22.739	6.79
13	n(C ₅ =C ₆)	26.378	13.177
14	n(C ₁ ≡C ₂)	45.754	4.856
15	n(C ₂ ≡C ₃)	54.165	6.153
16	n(C ₃ ≡C ₄)	49.521	7.082
17	n(C ₄ ≡C ₅)	46.556	7.88
18	n(C ₅ ≡C ₆)	50.143	9.531
19	n(C ₆ ≡C ₇)	44.678	13.288
20	n(C-O)	-9.736	4.443
21	n(C-S)	8.233	4.91
22	n(C-Cl)	5.457	2.305
23	n(C=O)	20.262	9.705
24	n(O-H)	34.858	7.59
25	n(N-H)	32.888	1.972
26	n(S-H)	46.842	4.483
27	(BM)	1.803	0.09
28	(BM)sqr	-2.54E-03	0
29	n(C _{prim})sqr	0.655	0.231
30	n(C _{sek})sqr	-0.551	0.07
31	n(C-Calf)sqr	0.538	0.074
32	n(C-H)sqr	0.194	0.017
33	n(HXBM)	-2.17E-02	0.002
34	n(C _{prim} X BM)	-4.80E-02	0.009

Hasil Analisis Regresi Multilinier

Analisis terhadap descriptor-deskriptor titik didih seperti table 2 dan harga titik didih eksperimen dengan program SPSS memberikan hasil statistik. Model persamaan HKSS terbaik secara statistik dan persamaan hasil perhitungannya adalah sebagai berikut :

$$\begin{aligned}
 Td (K) = & 169,975 + 4,073 \times n(H) + 5,431 \times n(C_{sek\ alf}) + 5,845 \times n(C_{ter\ sik}) + \\
 & 13,431 \times n(C_{ter\ arm}) + 30,312 \times n(O) - 27,698 \times n(F) - 10,470 \times n(C-C_{alf}) + \\
 & 7,474 \times n(C=C_{arm}) + 27,958 \times n(C_1=C_2) + 18,656 \times n(C_2=C_3) + \\
 & 15,324 \times n(C_3=C_4) + 22,739 \times n(C_4=C_5) + 26,378 \times n(C_5=C_6) + \\
 & 45,754 \times n(C_1 \equiv C_2) + 54,165 \times n(C_2 \equiv C_3) + 49,521 \times n(C_3 \equiv C_4) + \\
 & 46,556 \times n(C_4 \equiv C_5) + 50,143 \times n(C_5 \equiv C_6) + 44,678 \times n(C_6 \equiv C_7) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 9,736 \times n(C-O) + 8,233 \times n(C-S) + 5,457 \times n(C-Cl) + 20,262 \times n(C=O) + \\
& 34,858 \times n(O-H) + 32,888 \times n(N-H) + 46,842 \times n(S-H) + 1,803 \times (BM) - \\
& 0,002538 \times (BM)_{sqr} + 0,655 \times n(C_{prim})_{sqr} - 0,551 \times n(C_{sek})_{sqr} + \\
& 0,538 \times n(C-C_{alf})_{sqr} + 0,194 \times n(C-H)_{sqr} - 0,02172 \times n(HXBM) - \\
& 4.796 \times 10^{-2} \times n(C_{prim} \times BM). \dots\dots\dots(1)
\end{aligned}$$

dari persamaan tersebut dihasil parameter statistik pada tabel 3.

Tabel 3. Parameter statistik

No.	n	r	SE	F _{hitung}	F _{tabel}	F _{hitung} /F _{tabel}
1	447	0,992	13,014	764,121	1,458	524,029

Dari tabel 3 menunjukkan bahwa model persamaan (1) merupakan persamaan yang cukup baik, hal ini terlihat dari harga r yang tinggi (yaitu 0,992) yang menunjukkan bahwa harda Td (K) prediksi relatif memiliki harga yang berdekatan dengan harga Td (K) eksperimen. Hal ini terlihat pada grafik pada gambar 1 yang menunjukkan hubungan Td (K) prediksi versus Td (K) eksperimen. Titik-titik sebaran terlihat mendekati garis lurus teoritis yang menunjukkan r = 1.

Harga F hitung yang relatif memenuhi syarat signifikan yaitu 764,121 jauh lebih besar dari pada F tabel yang hanya 1,458, sehingga tingkat kepercayaan 95 % yang ditunjukkan oleh perbandingan F_{hitung} / F_{tabel} lebih besar 1. Dengan demikian dari segi statistika model hubungan tersebut sangat signifikan untuk menyatakan keterkaitan kuantitatif dari titik didih dengan descriptor frakmentasi.

Harga SE 13,014 K menunjukkan kesalahan yang relatif kecil. Harga Td berkisar pada rentang 184.55 K sampai 824.15 K dengan harga rata-rata sebesar 478.3938 K. Oleh karena itu persentase kesalahan prediksi dari model tersebut terhadap harga rata-rata Td_{eksperimen} masih cukup kecil yaitu (13,014/478,3939) x 100 % = 2.72035 %.

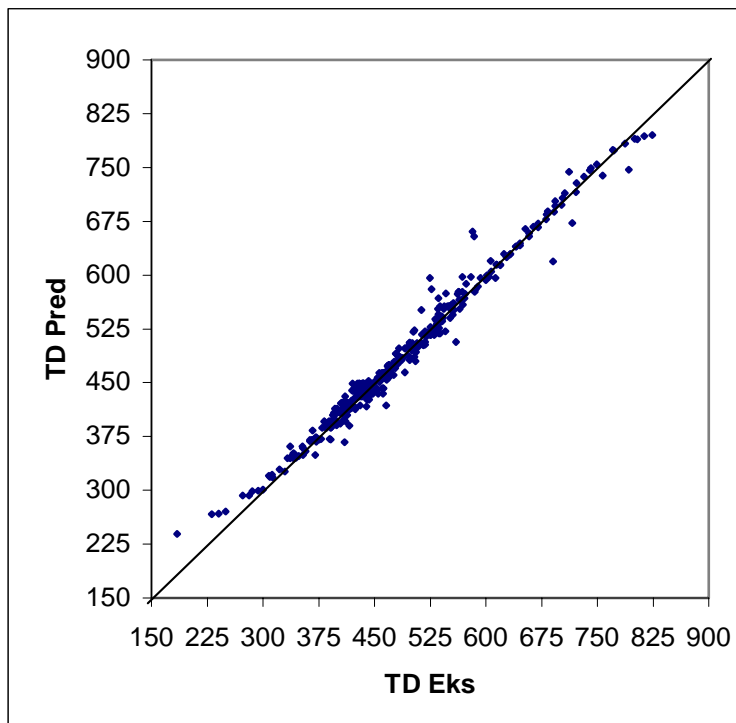
Persamaan (1) merupakan persamaan hubungan kuantitatif antara struktur kimia dengan titik didih (dalam K). Dari persamaan tersebut terlihat bahwa ada beberapa deskriptor bertanda positif seperti nampak pada tabel (2). Parameter bertanda positif sebanyak 37 deskriptor antara lain : n(H), n(Csek alf), n(Cter sik), n(Cter arm), n(O), n(C=Carm), n(C₁=C₂), n(C₂=C₃), n(C₃=C₄), n(C₄=C₅), n(C₅=C₆), n(C₁≡C₂), n(C₂≡C₃), n(C₃≡C₄), n(C₄≡C₅), n(C₅≡C₆), n(C₆≡C₇), n(C-S), n(C-Cl),

$n(\text{C}=\text{O})$, $n(\text{O}-\text{H})$, $n(\text{N}-\text{H})$, $n(\text{S}-\text{H})$, (BM), $n(\text{C}_{\text{prim}})\text{sqr}$, $n(\text{C}-\text{Calf})\text{sqr}$, $n(\text{C}-\text{H})\text{sqr}$. yang menunjukkan bahwa jumlah atom dalam senyawa tersebut memberikan pengaruh terhadap titik didih. Hal ini ditunjukkan dengan melihat konstanta pada parameter $n(\text{C}_{\text{sek}})$ misalnya yaitu 5,431. Dengan demikian semakin panjang rantai karbon pada senyawa dan semakin bertambah jumlah atom karbon sekunder yang membentuk senyawa, maka semakin besar titik didihnya.

Pada 7 deskriptor lainnya mempunyai parameter bertanda negatif antara lain : $n(\text{F})$, $n(\text{C}-\text{Calf})$, $n(\text{C}-\text{O})$, (BM) sqr , $n(\text{C}_{\text{sek}})\text{sqr}$, $n(\text{HXBM})$, $n(\text{C}_{\text{prim}} \times \text{BM})$ yang menunjukkan bahwa adanya atom F, ikatan C-C alifatis, ikatan C-O, berat molekul kwadrat, jumlah atom H kali berat molekul, dan jumlah atom C primer kali berat molekul memberikan sumbangan yang negatif (mengurangi) titik didih yang diperlukan senyawa tersebut untuk mendidih.

Jadi pemodelan hasil analisis regresi multilinier memberikan estimasi atau pendekatan yang beralasan untuk mengetahui besarnya titik didih suatu senyawa yang tidak diketahui, terutama jika senyawa yang akan dicobakan termasuk pada daerah intrapolasi dari persamaan (1).

Apabila persamaan (1) digunakan untuk menghitung harga titik didih teoritis dengan data descriptor fragmental maka dapat ditentukan harga titik didih prediksi. Data hasil perhitungan disajikan dalam bentuk grafik seperti pada gambar 1. Pada gambar 1 ditunjukkan suatu garis lurus yang menunjukkan hasil ideal $y = x$ (atau $Td(\text{K})_{\text{prediksi}} = Td(\text{K})_{\text{eksperimen}}$) untuk membandingkan apabila tingkat prediksi yang baik maka akan menghasilkan garis ideal.



Gambar 1. Titik didih eksperimen vs prediksi

KESIMPULAN

1. Jumlah atom, jumlah ikatan tunggal, rangkap dua, rangkap tiga, dan berat molekul dapat digunakan sebagai deskriptor pada kajian hubungan kuantitatif struktur-sifat (HKSS).
2. Hubungan kuantitatif antara jumlah atom, jumlah ikatan tunggal, rangkap dua, rangkap tiga, dan berat molekul pada atom-atom penyusun senyawa-senyawa organik menunjukkan hubungan kuantitatif linearistik yang signifikan terhadap titik didih.

DAFTAR PUSTAKA

- Brasquet, C., Bourges, B., and Cloirec, P.L., 1999, Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) for the Adsorption of Organic Compounds onto Activated Carbon Cloth : Comparison between Multiple Linear Regression and/ Neural Network, *Environ.Sci.Technol.*, 33, 4226 –4231.
- Basak, S.C., Gute, B.D., Grunwald, G.D., 1996, *A Comparative Study of Topological and Geometrical Parameters in Estimating Normal Boiling Points and Octanol/Water Partition Coefficient*, *J.Chem.Inf.Comput.Sci.*, 36, 1054 – 1060.

- Balaban, A.T., Joshi, N., Kier, L.B., Hall, L.H., 1992, *Correlations between Chemical Structure and Normal Boiling Points of Halogenated Alkanes C₁ – C₄*, J.Chem.Inf.Comput.Sci., 32, 233 – 237.
- Balaban, A.T., Kier, L.B., Joshi, N., 1992, *Correlations between Chemical Structure and Normal Boiling Points of Acyclic Ethers, Peroxides, Acetals, and Their Sulfur Analogues*, J.Chem.Inf.Comput.Sci., 32, 237 – 244.
- Carlton, T. S., 1998, *Correlation of Boiling Point with Molecular Structure for Chlorofluoroethanes*, J.Chem.Inf.Comput.Sci., 38, 158 - 164.
- Lide, D.R., 2000, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press Boca Raton London.
- Katritzky, A.R., Labanov, V.S., 1988, *Normal Boiling Points for Organic Compounds: Correlation and Prediction by a Quantitative Structure-Property Relationship*, J.Chem.Inf.Comput.Sci., 38, 28-41.
- Katritzky, A.R., Mu, L., Labanov, V.S., 1996, *Correlation of Boiling Point with Molecular Structure. 1. A Training set of 298 Diverse Organics and a Test Set of 9 Simple Inorganics*, J.Phys.Chem., 100, 10400 – 10407.
- Karelson, M., Labanov, V.S., Katritzky, A.R., 1996, *Quantum Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies*, Chem.Rev., 96, 1027 – 1043.
- Le, T.D., Weers, J.G., 1995, *QSPR and GCA Models for Predicting the Normal Boiling Points of Fluorocarbons*, J.Phys.Chem., 99, 6739 – 6747.
- Stanton, D.T., Egolf, L.M., Jurs, P.C., 1992, *Computer-Assisted Prediction of Normal Boiling Points of Pyrans and Pyrroles*, J.Chem.Inf.Comput.Sci., 32, 306 – 316.
- Zaman, A.A., McNally, T.W., Fricke, A.L., 1998, *Vapor Pressure and Boiling Point Elevation of Slash Pine Black Liquors : Predictive Models with Statistical Approach*, Ind.Eng.Chem.Res., 37, 275 – 283.