

ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-TITIK DIDIH NORMAL SENYAWA HALOETANA

Quantitative Analysis on Structure–Normal Boiling Points Relationship of Haloethanes

Uripto Trisno Santoso¹

¹Program Studi Kimia, Fakultas MIPA Unlam, Jl. Jend. A. Yani Km. 36 Banjarbaru,
Kalimantan Selatan 70714 Telp: 05114773112
email: uriptotrisnosantoso@gmail.com

ABSTRAK

Pada kajian ini, model QSPR (*Quantitative Structure-Property Relationship*) yang sederhana telah dikembangkan untuk menganalisis korelasi antara parameter-parameter struktur dan titik didih normal senyawa haloetana (T_d). Model QSPR yang dikembangkan merupakan suatu persamaan regresi linear ganda sebagai fungsi enam deskriptor yang diturunkan langsung dari struktur molekul. Mengingat tingginya polaritas ikatan C-X ($X = F, Cl, Br, I$) dan polarisabilitas gugus CHX_2 and CX_3 maka jumlah atom F, Cl, Br, dan I, serta jumlah gugus CHX_2 and CX_3 yang digunakan sebagai deskriptor dalam kajian ini. Hasil prediksi sesuai dengan nilai-nilai T_d eksperimen dengan koefisien korelasi (r) dan koefisien korelasi *leave-one-out cross-validation* (Q^2) berturut-turut sebesar 0,995 dan 0,991. Model memprediksi nilai T_d sebesar 347 ± 6 dan 362 ± 6 K berturut-turut untuk 1,1-dikloro-2-fluoroetana dan 1,1,1-trikloro-2-fluoroetana (senyawa yang belum diketahui/tersedia hingga saat ini).

Kata kunci: Titik didih, etana, QSPR, regresi, korelasi.

ABSTRACT

The correlation between structures of haloethane (64 compounds) and their normal boiling points (T_b) has been developed using a quantitative structure–property relationship (QSPR) method. The QSPR model was a multiple linear regressions (MLR) of six descriptors that were derived directly from molecular structure. Underlying our QSPR mathematical models is a physical model that highlights certain relationships between intermolecular forces and structural features. Considering highly polar C–X ($X = F, Cl, Br, I$) bonds and polarizability CHX_2 and CX_3 groups, the total number of F, Cl, Br, and I atoms, and also the number of CHX_2 and CX_3 groups were used as descriptor. The prediction results agree well with the experimental values of T_b with correlation coefficient (r) and the correlation coefficient of leave-one-out cross-validation (Q^2) are 0.995 and 0.991, respectively. The model predicts T_b values of 347 ± 6 and 362 ± 6 K for unknown 1,1-dichloro-2-fluoroethane and 1,1,1-trichloro-2-fluoroethane, respectively.

Keywords: Boiling point, haloethane, QSPR, regression, correlation.

PENDAHULUAN

Titik didih normal (titik didih pada tekanan 1 atmosfer) merupakan salah satu dari sifat fisikokimia yang biasa digunakan untuk mengkarakterisasi suatu senyawa. Selain sebagai indikator wujud fisik suatu

senyawa, titik didih normal (T_d) juga merupakan petunjuk tentang volatilitas senyawa tersebut. Titik didih normal juga bisa digunakan untuk memprediksi berbagai sifat fisika yang lain, seperti: temperatur kritis, titik nyala, entalpi penguapan, dan lain-lain. Jika keadaan murni sulit diperoleh atau belum ada

atau akan sulit mengatasi resiko bahayanya bila senyawa tersebut dipanaskan, maka penentuan T_d menjadi tidak mudah dilakukan. Oleh karenanya, suatu metode yang dapat digunakan untuk mengestimasi T_d normal tanpa melakukan kegiatan pengukuran atau percobaan di laboratorium juga perlu dikembangkan (Katritzky dkk., 1998).

Banyak model matematis persamaan QSPR (*Quantitative Structure-Property Relationship*) yang telah dikembangkan guna mengestimasi T_d (Aboali dkk., 2014). Model QSPR yang melibatkan senyawa organik multifungsi biasanya memiliki simpangan baku relatif tinggi. Stein & Brown (1994) menunjukkan bahwa model QSPR yang diperoleh memiliki simpangan baku sebesar 15,5 K jika dikaji menggunakan 4426 senyawa organik yang berbeda dan simpangan baku sebesar 20,4 K jika dikaji menggunakan 6584 senyawa organik yang berbeda. Ini mengindikasikan bahwa upaya membuat model yang lebih general agar berlaku untuk semua kelas atau kelompok senyawa organik cenderung memberikan simpangan baku yang lebih besar (Katritzky dkk., 1998).

Model QSPR yang melibatkan senyawa organik "sekelas" (jenis gugus fungsi yang sama atau sejenis) umumnya memiliki simpangan baku relatif rendah. Sebagai contoh, model QSPR untuk 752 senyawa furan, tetrahidrofuran, tiopena, piran, dan pirol memiliki simpangan baku (s) = 13,1 K dengan koefisien determinansi (R^2) = 0,954. Model QSPR untuk 209 senyawa furan dan

tetrahidrofuran memiliki s = 11,2 K dengan R^2 = 0,968 (Katritzky dkk., 1998). Model QSPR senyawa haloalkana jumlah atom karbon 1-4 memiliki s = 10,9 K dengan R^2 = 0,970 untuk 532 buah senyawa (Balaban dkk., 1992) dan s = 8,5 K dengan R^2 = 0,992 untuk 276 buah senyawa (Balaban dkk., 1994). Dengan mempersempit variasi haloalkana ini, Carlton (1998) menunjukkan bahwa model QSPR terhadap 52 senyawa klorofloroetana dapat memiliki s = 2,6 K dengan koefisien determinansi R^2 = 0,998. Ini menunjukkan bahwa model yang diterapkan pada sejumlah senyawa yang sekelas cenderung akan memiliki keakuratan yang lebih baik.

Namun demikian, model QSPR yang variasi senyawanya terlalu sempit mungkin tidak dapat diterapkan pada senyawa yang berbeda (dalam kelas yang sama). Sebagai contoh, Carlton (1998) hanya menerapkan model tersebut terhadap senyawa-senyawa klorofloroetana, tidak mengkaji model tersebut terhadap kelompok senyawa haloetana yang lain, seperti: iodobromoetana, iodofloroetana, bromofloroetana, dan sebagainya. Dalam upaya untuk mendapatkan model yang bersifat lebih *general* untuk senyawa yang "sekelas", pada artikel ini dilaporkan hasil kajian QSPR senyawa haloetana (dengan halo = unsur halogen, yaitu: F, Cl, Br, dan I). Pada penelitian ini, senyawa haloetana yang diuji sebanyak 64 buah dan deskriptor yang digunakan meliputi jumlah atom F, Cl, Br, dan I, serta jumlah gugus CHX_2 dan CX_3 .

METODOLOGI PENELITIAN

Alat dan Bahan

Alat utama yang digunakan pada penelitian ini adalah seperangkat komputer personal yang dilengkapi dengan sistem operasi Windows® (Microsoft®) dan Excel® 2000 (Microsoft®). Senyawa yang diuji sebanyak 64 buah senyawa haloetana ditambah 1 buah etana. Nilai titik didih normal eksperimen senyawa ini sama dengan titik didih normal eksperimen dari literatur (Katritzky dkk. 1998; Carlton dkk., 1998).

Prosedur Penelitian

Model matematis

Parameter struktur molekul yang diuji sebagai deskriptor meliputi jumlah atom F (nF), jumlah atom Cl (nCl), jumlah atom Br (nBr), jumlah atom I (nl), jumlah atom H (nH), jumlah gugus CH_2X (nCH_2X), jumlah gugus CHX_2 ($nCHX_2$), dan jumlah gugus CX_3 (nCX_3). Nilai koefisien determinasi regresi linear ganda (R^2) dan koefisien korelasi (r) dihitung dengan menggunakan alat bantu analisis yang terdapat pada perangkat lunak *Microsoft Excel 2000 (Regression Analysis*

Too). Uji F dan uji t juga ditentukan dengan menggunakan *Microsoft Excel 2000*.

Kuadrat validasi silang LOO (Q^2) menjadi indikator *performance* dan stabilitas model, dan dihitung menurut rumus persamaan (1)

$$Q^2 = 1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2} \quad \dots(1)$$

dengan

y_i = nilai titik didih normal eksperimen

\bar{y} = nilai titik didih normal eksperimen rata-rata

\hat{y}_i = nilai titik didih normal prediksi senyawa i

Validasi metode LOO akan memberikan model terpilih, tetapi persamaan terbaik harus memiliki kriteria statistik signifikan yaitu memiliki $r \geq 0,8$ dan $Q^2 \geq 0,5$ (Aman & Daryono, 2013) atau $R^2 > 0,6$ dan $Q^2 > 0,5$ (Kiralj dkk, 2009).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Titik didih normal eksperimen dan nilai deskriptor jumlah atom dan jumlah gugus yang digunakan dalam penelitian ini adalah jumlah atom F, Cl, Br, I dan H, serta jumlah gugus CH_2X , CHX_2 , dan CX_3 dari 65 senyawa haloetana disajikan pada Tabel 1.

Tabel 1. Titik didih normal eksperimen dan nilai deskriptor jumlah atom dan gugus CH_2X , CHX_2 dan CX_3 senyawa haloetana.

No	split formula	T_b (K)	nF	nCl	nBr	nl	nH	nCH_3	nCH_2X	$nCHX_2$	nCX_3
1	CCl ₃	CCl ₃	457.60	0	6	0	0	0	0	0	2
2	CCl ₃	CCl ₂ F	411.10	1	5	0	0	0	0	0	2
3	CCl ₂ F	CCl ₂ F	365.88	2	4	0	0	0	0	0	2
4	CCl ₃	CClF ₂	365.91	2	4	0	0	0	0	0	2
5	CCl ₂ F	CClF ₂	320.74	3	3	0	0	0	0	0	2
6	CCl ₃	CF ₂	318.61	3	3	0	0	0	0	0	2

7	CCIF ₂	CCIF ₂	276.58	4	2	0	0	0	0	0	0	2
8	CCl ₂ F	CF ₃	276.59	4	2	0	0	0	0	0	0	2
9	CCIF ₂	CF ₃	234.08	5	1	0	0	0	0	0	0	2
10	CF ₃	CF ₃	195.22	6	0	0	0	0	0	0	0	2
11	CCl ₃	CHCl ₂	433.03	0	5	0	0	1	0	0	1	1
12	CCl ₃	CHCIF	390.20	1	4	0	0	1	0	0	1	1
13	CCl ₂ F	CHCl ₂	389.80	1	4	0	0	1	0	0	1	1
14	CCl ₃	CHF ₂	346.00	2	3	0	0	1	0	0	1	1
15	CCl ₂ F	CHCIF	345.70	2	3	0	0	1	0	0	1	1
16	CCIF ₂	CHCl ₂	345.10	2	3	0	0	1	0	0	1	1
17	CCl ₂ F	CHF ₂	303.40	3	2	0	0	1	0	0	1	1
18	CCIF ₂	CHCIF	302.70	3	2	0	0	1	0	0	1	1
19	CF ₃	CHCl ₂	300.81	3	2	0	0	1	0	0	1	1
20	CF ₃	CHCIF	261.19	4	1	0	0	1	0	0	1	1
21	CCIF ₂	CHF ₂	261.41	4	1	0	0	1	0	0	1	1
22	CF ₃	CHF ₂	225.06	5	0	0	0	1	0	0	1	1
23	CHCl ₂	CHCl ₂	418.30	0	4	0	0	2	0	0	2	0
24	CHCl ₂	CHCIF	375.60	1	3	0	0	2	0	0	2	0
25	CHCl ₂	CHF ₂	333.00	2	2	0	0	2	0	0	2	0
26	CHCIF	CHCIF	332.80	2	2	0	0	2	0	0	2	0
27	CHCIF	CHF ₂	290.40	3	1	0	0	2	0	0	2	0
28	CHF ₂	CHF ₂	253.10	4	0	0	0	2	0	0	2	0
29	CCl ₃	CH ₂ Cl	403.35	0	4	0	0	2	0	1	0	1
30	CCl ₂ F	CH ₂ Cl	361.20	1	3	0	0	2	0	1	0	1
31	CCIF ₂	CH ₂ Cl	319.30	2	2	0	0	2	0	1	0	1
32	CF ₃	CH ₂ Cl	279.25	3	1	0	0	2	0	1	0	1
33	CCl ₂ F	CH ₂ F	321.60	2	2	0	0	2	0	1	0	1
34	CCIF ₂	CH ₂ F	285.00	3	1	0	0	2	0	1	0	1
35	CF ₃	CH ₂ F	247.03	4	0	0	0	2	0	1	0	1
36	CHCl ₂	CH ₂ Cl	387.00	0	3	0	0	3	0	1	1	0
37	CHCIF	CH ₂ Cl	347.00	1	2	0	0	3	0	1	1	0
38	CHF ₂	CH ₂ Cl	308.30	2	1	0	0	3	0	1	1	0
39	CHCIF	CH ₂ F	308.20	2	1	0	0	3	0	1	1	0
40	CHF ₂	CH ₂ F	276.85	3	0	0	0	3	0	1	1	0
41	CCl ₃	CH ₃	347.23	0	3	0	0	3	1	0	0	1
42	CCl ₂ F	CH ₃	305.20	1	2	0	0	3	1	0	0	1
43	CCIF ₂	CH ₃	264.05	2	1	0	0	3	1	0	0	1
44	CF ₃	CH ₃	225.86	3	0	0	0	3	1	0	0	1
45	CHCl ₂	CH ₃	330.45	0	2	0	0	4	1	0	1	0
46	CHCIF	CH ₃	289.30	1	1	0	0	4	1	0	1	0
47	CHF ₂	CH ₃	249.10	2	0	0	0	4	1	0	1	0
48	CH ₂ Cl	CH ₂ Cl	356.66	0	2	0	0	4	0	2	0	0
49	CH ₂ Cl	CH ₂ F	325.91	1	1	0	0	4	0	2	0	0

50	CH ₂ F	CH ₂ F	283.70	2	0	0	0	4	0	2	0	0
51	CH ₂ Cl	CH ₃	285.42	0	1	0	0	5	1	1	0	0
52	CH ₂ F	CH ₃	235.43	1	0	0	0	5	1	1	0	0
53	CH ₃	CH ₃	184.57	0	0	0	0	6	1	0	0	0
54	CBrF ₂	CBrF ₂	320.15	4	0	2	0	0	0	0	0	2
55	CHBrF	CHBrF	368.65	2	0	2	0	2	0	0	2	0
56	CH ₃	CH ₂ I	344.15	0	0	0	1	5	1	1	0	0
57	CH ₂ Br	CF ₃	299.65	3	0	1	0	2	0	1	0	1
58	CH ₂ I	CF ₃	327.95	3	0	0	1	2	0	1	0	1
59	CH ₂ Br	CH ₂ Cl	379.65	0	1	1	0	4	0	2	0	0
60	CH ₂ Br	CH ₂ F	344.90	1	0	1	0	4	0	2	0	0
61	CH ₂ Br	CH ₂ Br	404.65	0	0	2	0	4	0	2	0	0
62	CH ₃	CH ₂ I	344.15	0	0	0	1	5	1	1	0	0
63	CHBr ₂	CHBr ₂	516.70	0	0	4	0	2	0	0	2	0
64	CHBr ₂	CH ₃	381.10	0	0	2	0	4	1	0	1	0
65	CH ₂ Br	CH ₃	311.50	0	0	1	0	5	1	1	0	0

Hasil analisis regresi linear ganda menggunakan 9 deskriptor (Tabel 1) terhadap 65 senyawa (64 senyawa haloetana ditambah 1 etana) diperoleh nilai R^2 sebesar 0,9836 dan nilai F_{hitung} sebesar 367. Nilai R^2 sangat dekat dengan 1 dan nilai F_{hitung} ini lebih besar daripada F_{tabel} tetapi nilai simpangan baku (*standard error*)-nya masih cukup tinggi (8,59 K). Analisis lebih lanjut, nilai *standard*

error (SE) masing-masing variabel (deskriptor), seperti yang ditunjukkan pada Tabel 2, tampak bahwa variabel jumlah atom H, CH₃ dan CH₂X memiliki SE yang sangat besar. Percobaan selanjutnya adalah menghilangkan 3 variabel ini sehingga tersisa 6 variabel, yaitu deskriptor $nCHX_2$, nCX_3 , nF , nCl , nBr dan nI , dengan nilai *standard error* juga disajikan pada Tabel 2.

Tabel 2. Nilai koefisien deskriptor, *standard error* (SE) dan nilai t_{hitung} untuk model 9 deskriptor dan 6 deskriptor

Deskriptor	Model 9 deskriptor		Model 6 deskriptor	
	koefisien ± SE	t_{hitung}	koefisien ± SE	t_{hitung}
<i>Intercept</i>	-3000,12 ± 0	65535	222,63 ± 4,32	51,57
nF	-110,43 ± 0	65535	27,41 ± 2,67	10,25
nCl	-68,29 ± 0	65535	69,55 ± 2,71	25,66
nBr	-45,28 ± 0	65535	92,56 ± 2,98	31,06
nI	-17,31 ± 0	65535	120,53 ± 6,04	19,94
nH	232,40 ± 66506689,71	$3,49 \cdot 10^{-6}$		
nCH_3	914,18 ± 126805762,90	$7,21 \cdot 10^{-6}$		
nCH_2X	1284,43 ± 58613729,73	$2,19 \cdot 10^{-6}$		
$nCHX_2$	1613,70 ± 0	65535	-40,97 ± 3,79	-10,81
nCX_3	1929,46 ± 0	65535	-95,45 ± 6,36	-15,02

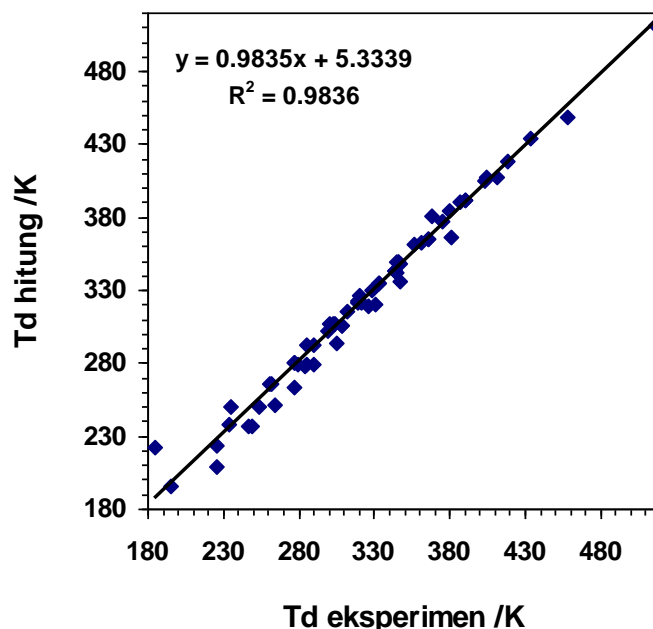
Hasil perhitungan secara statistik terhadap 6 variabel deskriptor $nCHX_2$, nCX_3 , nF , nCl , nBr dan nI menunjukkan peningkatan kualitas model, yaitu nilai simpangan baku turun menjadi 8,36 K, nilai $R^2 = 0,9836$, dan nilai F naik menjadi 580. Oleh karena itu, pada taraf kepercayaan 95%, hasil perhitungan yang terakhir ini

$$T_d = 222,63 + 27,41 \cdot nF + 69,55 \cdot nCl + 92,56 \cdot nBr + 120,53 \cdot nI - 40,97 \cdot nCHX_2 - 95,45 \cdot nCX_3 \quad ..(2)$$

Hasil plot titik didih normal hitung versus titik didih normal eksperimen dapat dilihat pada Gambar 1 sedangkan nilai residu masing-masing titik data dapat dilihat pada Tabel 3. Pada Gambar 1 tampak bahwa terdapat hubungan yang linear antara T_d hitung (hasil perhitungan dengan menggunakan model 6 deskriptor) dan T_d

dianggap sudah cukup baik. Dengan demikian dapat dinyatakan bahwa terdapat korelasi linear (gemaris) antara parameter struktur molekul dengan titik didih (T_d) normal senyawa haloetana dengan deskriptor nF , nCl , nBr , nI , $nCHX_2$ dan nCX_3 , dengan model persamaan seperti pada persamaan (2).

eksperimen dengan koefisien determinasi $R^2 = 0,9836$ dengan nilai kemiringan $slope = 0,9835$ (sangat dekat dengan 1). Namun demikian, jika diperhatikan lebih lanjut, pada Gambar 1 terdapat satu titik yang sedikit jauh dari garis *trendline*, yakni pada titik (184,57; 222,63), yang merupakan data untuk molekul etana (nilai residu -38,06 K, nomer senyawa 53 dalam Tabel 3).



Gambar 1. T_d hitung versus T_d eksperimen untuk 65 senyawa haloetana.

Tabel 3. Titik didih normal eksperimen dan titik didih normal hasil perhitungan (prediksi) serta nilai residunya untuk 65 senyawa

No.	split formula	T_d eksperimen /K	T_d hitung /K	residu/K
1	CCl ₃ CCl ₃	457.60	449.03	8.57
2	CCl ₃ CCl ₂ F	411.10	406.89	4.21
3	CCl ₂ F CCl ₂ F	365.88	364.75	1.13
4	CCl ₃ CCIF ₂	365.91	364.75	1.16
5	CCl ₂ F CCIF ₂	320.74	322.61	-1.87
6	CCl ₃ CF ₂	318.61	322.61	-4.00
7	CCIF ₂ CCIF ₂	276.58	280.47	-3.89
8	CCl ₂ F CF ₃	276.59	280.47	-3.88
9	CCIF ₂ CF ₃	234.08	238.33	-4.25
10	CF ₃ CF ₃	195.22	196.19	-0.97
11	CCl ₃ CHCl ₂	433.03	433.96	-0.93
12	CCl ₃ CHClF	390.20	391.82	-1.62
13	CCl ₂ F CHCl ₂	389.80	391.82	-2.02
14	CCl ₃ CHF ₂	346.00	349.68	-3.68
15	CCl ₂ F CHClF	345.70	349.68	-3.98
16	CCIF ₂ CHCl ₂	345.10	349.68	-4.58
17	CCl ₂ F CHF ₂	303.40	307.54	-4.14
18	CCIF ₂ CHClF	302.70	307.54	-4.84
19	CF ₃ CHCl ₂	300.81	307.54	-6.73
20	CF ₃ CHClF	261.19	265.40	-4.21
21	CCIF ₂ CHF ₂	261.41	265.40	-3.99
22	CF ₃ CHF ₂	225.06	223.26	1.80
23	CHCl ₂ CHCl ₂	418.30	418.89	-0.59
24	CHCl ₂ CHClF	375.60	376.75	-1.15
25	CHCl ₂ CHF ₂	333.00	334.61	-1.61
26	CHClF CHClF	332.80	334.61	-1.81
27	CHClF CHF ₂	290.40	292.47	-2.07
28	CHF ₂ CHF ₂	253.10	250.33	2.77
29	CCl ₃ CH ₂ Cl	403.35	405.38	-2.03
30	CCl ₂ F CH ₂ Cl	361.20	363.24	-2.04
31	CCIF ₂ CH ₂ Cl	319.30	321.10	-1.80
32	CF ₃ CH ₂ Cl	279.25	278.96	0.29
33	CCl ₂ F CH ₂ F	321.60	321.10	0.50
34	CCIF ₂ CH ₂ F	285.00	278.96	6.04
35	CF ₃ CH ₂ F	247.03	236.82	10.21
36	CHCl ₂ CH ₂ Cl	387.00	390.31	-3.31
37	CHClF CH ₂ Cl	347.00	348.17	-1.17
38	CHF ₂ CH ₂ Cl	308.30	306.03	2.27
39	CHClF CH ₂ F	308.20	306.03	2.17
40	CHF ₂ CH ₂ F	276.85	263.89	12.96

41	CCl ₃	CH ₃	347.23	335.83	11.40
42	CCl ₂ F	CH ₃	305.20	293.69	11.51
43	CClF ₂	CH ₃	264.05	251.55	12.50
44	CF ₃	CH ₃	225.86	209.41	16.45
45	CHCl ₂	CH ₃	330.45	320.76	9.69
46	CHClF	CH ₃	289.30	278.62	10.68
47	CHF ₂	CH ₃	249.10	236.48	12.62
48	CH ₂ Cl	CH ₂ Cl	356.66	361.73	-5.07
49	CH ₂ Cl	CH ₂ F	325.91	319.59	6.32
50	CH ₂ F	CH ₂ F	283.70	277.45	6.25
51	CH ₂ Cl	CH ₃	285.42	292.18	-6.76
52	CH ₂ F	CH ₃	235.43	250.04	-14.61
53	CH ₃	CH ₃	184.57	222.63	-38.06
54	CBrF ₂	CBrF ₂	320.15	326.49	-6.34
55	CHBrF	CHBrF	368.65	380.63	-11.98
56	CH ₃	CH ₂ I	344.15	343.16	0.99
57	CH ₂ Br	CF ₃	299.65	301.97	-2.32
58	CH ₂ I	CF ₃	327.95	329.94	-1.99
59	CH ₂ Br	CH ₂ Cl	379.65	384.74	-5.09
60	CH ₂ Br	CH ₂ F	344.90	342.60	2.30
61	CH ₂ Br	CH ₂ Br	404.65	407.75	-3.10
62	CH ₃	CH ₂ I	344.15	343.16	0.99
63	CHBr ₂	CHBr ₂	516.70	510.93	5.77
64	CHBr ₂	CH ₃	381.10	366.78	14.32
65	CH ₂ Br	CH ₃	311.50	315.19	-3.69

Selanjutnya, hasil analisis statistik terhadap 64 senyawa haloetana (tanpa molekul etana) menggunakan model 6 deskriptor tersebut diperoleh model yang lebih baik karena simpangan baku hanya 6,05 K dengan $R^2 = 0,9908$ dan $F = 1029$. Dengan demikian, model 6 deskriptor ini sangat cocok dijadikan sebagai prediktor T_d

senyawa haloetana. Dilihat dari nilai SE (*standar error*) maupun t_{hitung} pada Tabel 4 dapat diketahui bahwa model 6 deskriptor yang diterapkan terhadap 64 senyawa haloetana memberikan hasil perhitungan statistik yang lebih baik daripada untuk 64 senyawa haloetana yang ditambahkan 1 senyawa etana.

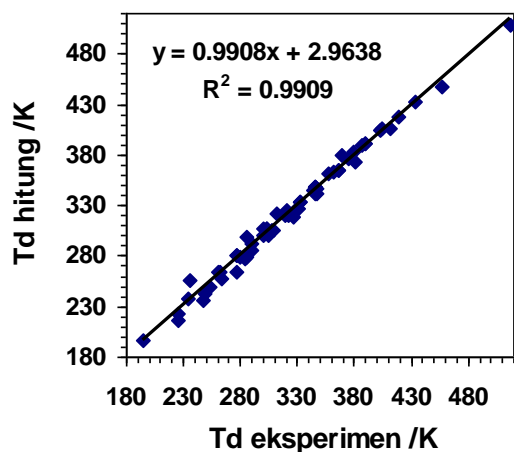
Tabel 4. Nilai koefisien deskriptor, *standard error* dan nilai t_{hitung} model 6 deskriptor untuk 65 senyawa (haloetana + etana) dan untuk 64 senyawa haloetana.

deskriptor	65 senyawa (64 haloetana + etana)		64 senyawa	
	koefisien \pm SE	t_{hitung}	koefisien \pm SE	t_{hitung}
Intercept	222,63 \pm 4,32	51,57	236,42 \pm 3,64	64,87
nF	27,41 \pm 2,67	10,25	20,22 \pm 2,17	9,33
nCl	69,55 \pm 2,71	25,66	62,23 \pm 2,20	28,29
nBr	92,56 \pm 2,98	31,06	84,98 \pm 2,39	35,54
nl	120,53 \pm 6,04	19,94	109,04 \pm 4,64	23,48
nCHX ₂	-40,97 \pm 3,79	-10,81	-33,72 \pm 2,91	-11,57
nCX ₃	-95,45 \pm 6,36	-15,02	-80,82 \pm 5,01	-16,12

Persamaan untuk model 6 deskriptor 64 senyawa haloetana ini dapat dituliskan dalam persamaan (3).

$$T_d = 236,42 + 20,22 \cdot nF + 62,23 \cdot nCl + 84,98 \cdot nBr + 109,04 \cdot nl - 33,72 \cdot nCHX_2 - 80,82 \cdot nCX_3 \quad \dots(3)$$

Plot hubungan antara T_d eksperimen dan T_d hitung sesuai dengan perhitungan dengan menggunakan persamaan (3) dapat ditunjukkan sebagaimana pada Gambar 2.



Gambar 2. T_d hitung versus T_d eksperimen untuk 64 senyawa haloetana.

Gambar 2 menunjukkan bahwa terdapat hubungan yang linear antara T_d hitung (hasil perhitungan dengan menggunakan model 6 deskriptor) dan T_d eksperimen dengan koefisien determinasi R^2

= 0,9909 dan nilai kemiringan *slope* = 0,9908 (sangat dekat dengan 1). Ini memperlihatkan bahwa model persamaan yang diperoleh memiliki kesesuaian yang sangat baik dalam memprediksi titik didih eksperimen terhadap 64 senyawa haloetana yang dikaji. Hasil analisis yang menunjukkan bahwa nilai koefisien korelasi (r) dan kuadrat validasi silang LOO (Q^2) berturut-turut sebesar 0,995 dan 0,991, mengindikasikan bahwa model ini merupakan model yang valid.

KESIMPULAN

Secara keseluruhan, hasil penelitian ini menunjukkan bahwa terdapat korelasi linear (gemaris) antara titik didih normal (T_d) senyawa haloetana dengan beberapa parameter struktur molekul. Parameter struktur molekul yang dapat digunakan untuk memprediksi T_d senyawa haloetana adalah

nF , nCl , nBr , nI , $nCHX_2$, dan nCX_3 dengan persamaan linear:

$$T_d = 236,42 + 20,22 \cdot nF + 62,23 \cdot nCl + 84,98 \cdot nBr + 109,04 \cdot nI - 33,72 \cdot nCHX_2 - 80,82 \cdot nCX_3$$

Persamaan ini dapat diterapkan dengan baik terhadap 64 senyawa haloetana dengan koefisien determinasi $R^2 = 0,991$, koefisien korelasi $r = 0,995$, simpangan baku = 6,05 K, $F_{hitung} = 1029$, dan kuadrat validasi silang LOO (Q^2) sebesar 0,991.

DAFTAR PUSTAKA

- Abooli, D., Sobati, dan M.A., 2014, Novel Method for Prediction of Normal Boiling Point and Enthalpy of Vaporization at Normal Boiling Point of Pure Refrigerants: A QSPR Approach. *International Journal of Refrigeration*. **40**: 282-293.
- Aman, L. O. dan Daryono, 2013, *Docking Molekuler Senyawa Turunan 2-Aminothieno[2,3-D] Pyrimidine sebagai Inhibitor H_{sp90}* , Laporan akhir Hibah Penelitian Kerjasama antar Perguruan Tinggi (Pekerti) Tahun Pelaksanaan 2013, Universitas Negeri Gorontalo.
- Balaban, A.T., C. Subhash, S. C. Basak, T. Colburn, dan G. D. Grunwaldt, 1994. Correlation between Structure and Normal Boiling Points of Haloalkanes C1-C4 Using Neural Networks. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **34**: 1118-1121.
- Balaban, A. T., J. Joshi, L. B. Kier, dan L. H. Hall, 1994. Correlations between Chemical Structure and Normal Boiling Points of Halogenated Alkanes C₁-C₄. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **32**:233-237.
- Carlton, T. S., 1998, Correlation of Boiling Points with Molecular Structure for Chlorofluoroethanes, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **38**: 158-164.
- Katritzky, A. R., V. S. Lobanov, dan M. Karelson, 1998. Normal Boiling Points for Organic Compounds: Correlation and Prediction by a Quantitative Structure-Property Relationship. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **38**: 28-41.
- Kiralj, R. dan M. M. C. Ferreira, 2009. Basic Validation Procedures for Regression Models in QSAR and QSPR Studies: Theory and Application. *J. Braz. Chem. Soc.*, **20**: 770-787.
- Stein, S. E. dan R. L. Brown, 1994, Estimation of Normal Boiling Points from Group Contributions, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **34**: 581-587.