



**PENGEMBANGAN MODEL LINEAR HKSS (HUBUNGAN  
KUANTITATIF STRUKTUR-SIFAT) TITIK DIDIH SENYAWA ISOMER  
ALKENA *CIS-TRANS* MENGGUNAKAN DESKRIPTOR 3-D**

**SKRIPSI**

**untuk memenuhi persyaratan  
dalam menyelesaikan program sarjana Strata-1 Kimia**

**Oleh:**

**Diah Lisa Setiani  
NIM 1911012220009**

**PROGRAM STUDI S-1 KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
BANJARBARU  
MARET 2023**

**SKRIPSI**

**PENGEMBANGAN MODEL LINEAR HKSS (HUBUNGAN  
KUANTITATIF STRUKTUR-SIFAT) TITIK DIDIH SENYAWA ISOMER  
ALKENA *CIS-TRANS* MENGGUNAKAN DESKRIPTOR 3-D**

**Oleh:**

**Diah Lisa Setiani  
NIM 1911012220009**

Pembimbing I



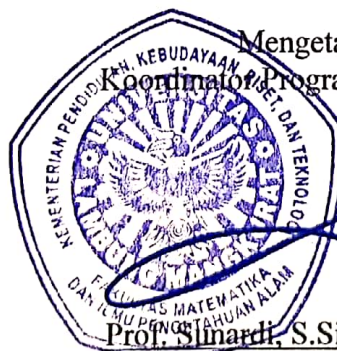
Dr. Uripto Trisno Santoso, S.Si., M.Si.  
NIP 19730727200012 1 001

Pembimbing II



Utami Irawati, S.Si., M.ES. Ph.D  
NIP 198210214200501 2 002

Mengetahui,  
Koordinator Program Studi Kimia



Prof. Sinaridi, S.Si., M.Sc., Ph.D  
NIP 19770820 200501 1 006

## PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Banjarbaru, Maret 2023



Diah Lisa Setiani

NIM 1911012220009

## ABSTRAK

**PENGEMBANGAN MODEL LINEAR HKSS (HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-SIFAT) TITIK DIDIH SENYAWA ISOMER ALKENA *CIS-TRANS* MENGGUNAKAN DESKRIPTOR 3-D (oleh: Diah Lisa Setiani; Pembimbing: Dr. Uriperto Trisno Santoso, S.Si., M.Si., Utami Irawati, S.Si., M.E.S., Ph.D; 2023; 32 halaman)**

Titik didih merupakan salah satu sifat fisikokimia yang digunakan untuk mengkarakterisasi dan mengidentifikasi suatu senyawa dalam memperkirakan sifat fisik lain suatu senyawa kimia lainnya. Pada serangkaian penelitian ini, fokus penelitian tertuju pada pengembangan model HKSS titik didih pada sekelompok senyawa isomer *cis-trans* melalui teknik RLB (Regresi Linear Berganda) menggunakan deskriptor 3-D. Dalam pengerjaannya, 39 senyawa isomer *cis-trans* digambar menggunakan aplikasi *Hyperchem 8.0* yang dilanjutkan dengan perhitungan deskriptor pada *website paDEL descriptor*. Sebanyak 392 deskriptor 3-D dan 2 tambahan deskriptor model dari Al-Malah (2013) (MW dan  $C_{frac}$ ), dilanjutkan dengan seruntutan prosedur berupa seleksi deskriptor hingga validitas suatu model berdasarkan parameter *goodness of fit*. Hasil dari penelitian ini didapatkan model terbaik, yaitu model 4 yang terdiri dari 3 deskriptor ( $P_{2m}$ ,  $L_{3e}$ , dan MW) dengan persamaan linear:

$$Y_{T_d} = 159,9663 - 36,4992(L_{3e}) + 101,5133(P_{2m}) + 2,150119 (MW)$$

Signifikansi persamaan HKSS yang didapat berupa nilai  $R = 0,9709$ ,  $R^2 = 0,9427$ ,  $R^2_{adj} = 0,9378$ ,  $SEE = 9,3631$ , validasi silang internal  $LMO = 0,9126$ ,  $Q^2(F1)$  validasi silang eksternal =  $0,9384$ , dan  $MAPE = 1,79089\%$  yang lebih kecil dibandingkan model pembanding Al-Malah (2013). Berdasarkan serangkaian keseluruhan penelitian yang dilakukan, model 4 dinyatakan valid secara statistika maupun kimia dengan hasil prediktabilitas model yang baik.

**Kata Kunci:** titik didih; HKSS; RLB; deskriptor; dan isomer *cis-trans*

## ABSTRACT

**DEVELOPMENT OF A QSPR LINEAR MODEL (QUANTITATIVE STRUCTURE-PROPERTIES RELATIONSHIP) BOILING POINT OF *CIS-TRANS* ALKENE ISOMERES USING 3-D DESCRIPTORS (by: Diah Lisa Setiani; Advisor: Dr. Uripto Trisno Santoso, S.Si., M.Si., Utami Irawati, S.Si., M.ES., Ph.D; 2023; 32 pages)**

Boiling point is one of the physicochemical properties used to characterize and identify a compound in terms of other physical characteristics than another chemical compound. In this series of studies, attention has been focused on developing a boiling point QSPR model for a group of *cis-trans* isomer compounds through the MLR (Multiple Linear Regression) technique using 3-D descriptors. In the process, 39 *cis-trans* isomer compounds were drawn using the Hyperchem 8.0 application, followed by descriptor calculations on the paDEL descriptor website. A total of 392 3-D descriptors and 2 additional descriptor models from Al-Malah (2013) (MW and  $C_{frac}$ ), followed by a series of procedures in the form of descriptor selection to the validity of a model based on fit parameters. The results of this study obtained the best model, namely model 4 which consists of 3 descriptors ( $P_{2m}$ ,  $L_{3e}$ , and MW) with a linear equation:

$$Y_{T_d} = 159,9663 - 36,4992(L_{3e}) + 101,5133(P_{2m}) + 2,150119 (MW)$$

The significance of the QSPR goods obtained was in the form of a value of  $R=0,9709$ ,  $R^2=0,9427$ ,  $R^2_{adj}=0,9378$ ,  $SEE=9,3631$ , internal cross validation LMO= $0,9126$ ,  $Q_2(F1)$  external cross validation= $0,9384$ , and MAPE =  $1,79089\%$  which is smaller than the Al-Malah (2013) comparison model. Based on a series of all studies conducted, model 4 was stated to be statistically and chemically valid with good model predictability results.

**Keywords:** boiling point, QSPR, MLR, descriptors, *cis-trans* isomers

## PRAKATA

Puji dan syukur kehadiran Allah SWT yang telah memberikan rahmat, nikmat serta karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian beserta penulisan skripsinya. Sholawat serta salam selalu tercurahkan kepada Rasulullah shalallahu 'alaihi wassalam beserta keluarga, kerabat, dan sahabatnya yang telah memberikan petunjuk dan membawa dari zaman jahiliyah menuju zaman ilmiah.

Penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan bimbingan, doa, dan dukungan untuk dapat menyelesaikan skripsi ini. Ucapan terima kasih ini penulis tujukan kepada yang terhormat:

1. Bapak Dr. Uripto Trisno Santoso, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing I dan Ibu Utami Irawati, S.Si., M.ES., Ph.D selaku Dosen Pembimbing II yang telah banyak memberikan bimbingan, pengetahuan, kritik, saran, motivasi, dan waktu yang telah diluangkan selama penelitian dan penyusunan skripsi.
2. Bapak/Ibu selaku Dosen Penguji yang telah menyediakan waktu dan memberikan kritik serta saran untuk penyusunan skripsi.
3. Bapak Dr. Tanto Budi Susilo, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Akademik selama kuliah di program studi Kimia FMIPA ULM.
4. Dosen dan staf pengajar di lingkungan Universitas Lambung Mangkurat terutama dosen program studi kimia.

Penulis menerima saran dan masukan dalam penulisan skripsi ini sehingga tulisan ini dapat memberikan manfaat bagi pembaca dan dapat berkontribusi dalam pengembangan ilmu pengetahuan.

Banjarbaru, Maret 2023

Penulis

## HALAMAN PERSEMBAHAN

Dengan rasa syukur yang mendalam, dengan telah diselesaikannya skripsi ini, penulis mengucapkan terima kasih dan mempersembahkannya kepada:

1. Tuhan Yang Maha Esa, yang selalu memberikan kekuatan, kesabaran, dan kelancaran dalam mengerjakan skripsi.
2. Diri sendiri yang mampu bertahan sampai sejauh ini.
3. Kedua orang tua tercinta dan keluarga yang dengan ketulusannya dari hati atas doa yang tak pernah putus dan semangat yang tak ternilai.
4. Para dosen pembimbing, Bapak Dr. Uripito Trisno Santoso, S.Si., M.Si. dan Ibu Utami Irawati, S.Si., M.ES., Ph.D yang dengan sabar membimbing penulis selama mengerjakan tugas akhir, dan dosen-dosen kimia FMIPA ULM lainnya yang telah memberikan ilmu bermanfaat selama menempuh pendidikan S-1.
5. Almamater kebanggaan, Universitas Lambung Mangkurat.
6. Teman-teman terdekat yang selalu mendengarkan keluh kesah serta motivasi yang membangun: Omar Daniel, Noor Hidayah, Nafia Fitrawati, Hanna Habibah, Sarmila, Nafisah, Emaratu Risqa, Ismira Dwi Safitri, Itqan Athaya Al-Khalily, Aisyah Putri Azzahra, Muhammad Ehsan, Ikhsan Mustari, Anggita Nurfitriani, Atina Sabila Azzahra, Helly Yanti Dwi Utami, dan teman seperjuangan jurusan kimia angkatan 2019 (*Rofthen Chemistry*).
7. Teman-teman tercinta lainnya: Alumni ketiga SMKS Intan Bara Husada Pelaihari program kejuruan farmasi, anggota KKN 14 Nabastala Pasayangan, anggota Biro Bismil BPP Ikahimki 2020-2022, dan teman-teman yang sedang berjuang tak kenal lelah dalam meraih gelarnya.

## DAFTAR ISI

	<b>Halaman</b>
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
<i>ABSTRACT</i>	v
PRAKATA	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR SINGKATAN	xii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian .....	3
1.4 Manfaat Penelitian .....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>4</b>
2.1 Titik Didih.....	4
2.2 Alkena .....	4
2.3 Isomer <i>Cis-Trans</i> .....	5
2.4 Hubungan Kuantitatif Struktur-Sifat (HKSS).....	6
2.5 Deskriptor .....	7
2.6 Regresi Linear Berganda (RLB) .....	9
2.7 Validasi Model KHSS.....	9
2.7.1 Validasi internal.....	10
2.7.2 Validasi eksternal .....	11
2.8 <i>Mean Absolute Percentage Error</i> (MAPE) .....	11

<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>13</b>
3.1 Jenis Penelitian.....	13
3.2 Waktu dan Tempat Penelitian.....	13
3.3 Variabel Penelitian.....	13
3.3.1 Variabel bebas.....	13
3.3.2 Variabel terikat.....	13
3.3.3 Variabel kontrol.....	13
3.4 Alat dan Bahan.....	13
3.4.1 Alat.....	13
3.4.2 Bahan.....	14
3.5 Prosedur Penelitian.....	15
3.5.1 Preparasi struktur kimia senyawa alkena <i>cis-trans</i> .....	15
3.5.2 Optimasi geometri.....	15
3.5.3 Pemilihan deskriptor.....	16
3.5.4 Analisis statistik.....	16
3.5.5 Validasi model dan perhitungan nilai MAPE.....	17
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>18</b>
4.1 Preparasi Struktur Kimia Senyawa Isomer Alkena <i>Cis-Trans</i> .....	18
4.2 Optimasi Geometri dan Perhitungan senyawa Isomer Alkena <i>Cis-Trans</i>	18
4.3 Deskriptor Terpilih Hasil Seleksi.....	18
4.4 Model Terbaik.....	19
4.5 Validasi Model HKSS Terpilih.....	22
4.6 Perhitungan Nilai MAPE pada Model Terpilih.....	23
<b>BAB V PENUTUP</b>	<b>28</b>
5.1 Kesimpulan.....	28
5.2 Saran.....	28
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	
<b>LAMPIRAN</b>	

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>	<b>Halaman</b>
1. Struktur dan titik didih alkena .....	5
2. Parameter deskriptor 3-D .....	7
3. Contoh deskriptor 3-D .....	8
4. <i>Range</i> nilai MAPE .....	12
5. Data nama senyawa dan titik didih eksperimental isomer alkena <i>cis-trans</i> .....	14
6. Hasil seleksi deskriptor .....	19
7. Data nilai p ( <i>p-value</i> ) .....	20
8. Hasil parameter <i>goodness of fit</i> .....	20
9. Data hasil validasi .....	23
10. Hasil perhitungan nilai MAPE .....	24

## DAFTAR LAMPIRAN

### Lampiran

1. Hasil Penggambaran Molekul dengan *Hyperchem 8.0*.
2. Data Hasil Perhitungan Deskriptor yang Digunakan
3. Uji Multikolinearitas
4. Valisasi Silang LOO
5. Validasi Silang LMO
6. Validasi Eksternal
7. Uji MAPE
8. Riwayat Hidup Penulis

## DAFTAR SINGKATAN

0-D	:	Nol dimensi
1-D	:	Satu dimensi
2-D	:	Dua dimensi
3-D	:	Tiga dimensi
4-D	:	Empat dimensi
AM1	:	<i>Austin Model 1</i>
DPSA <sub>3</sub>	:	<i>Difference in Charged Partial Surface Areas</i>
C <sub>frac</sub>	:	<i>Carbon Fraction</i>
HKSS	:	Hubungan Kuantitatif Struktur-Sifat
HKSA	:	Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas
L <sub>3e</sub>	:	<i>3<sup>rd</sup> component size non-directional WHIM index / weighted by relative Sanderson electronegativities</i>
LMO	:	<i>Leave Many Out</i>
LOO	:	<i>Leave One Out</i>
MAPE	:	<i>Mean Absolute Percentage Error</i>
MW	:	<i>Molecular Weight</i>
OECD	:	<i>Organisation for Economic Co-operation and Development</i>
P <sub>2m</sub>	:	<i>2<sup>nd</sup> component shape directional WHIM index/weighted by relative mass</i>
Q <sup>2</sup>	:	R <sup>2</sup> validasi silang
QSPR	:	<i>Quantitative Structure and Property Relationship</i>
R	:	Koefisien korelasi
R <sup>2</sup>	:	Koefisien determinasi
R <sup>2</sup> <sub>adj</sub>	:	R <sup>2</sup> yang telah disesuaikan ( <i>adjusted R<sup>2</sup></i> )
RLB	:	Regresi Linear Berganda
RMSEP	:	<i>Root Mean Square Error in Prediction</i>
SEE	:	<i>Standard Error of Estimate</i>
T <sub>d</sub>	:	Titik didih
WHIM	:	<i>Weighted Holistic Invariant Molecular descriptors</i>

