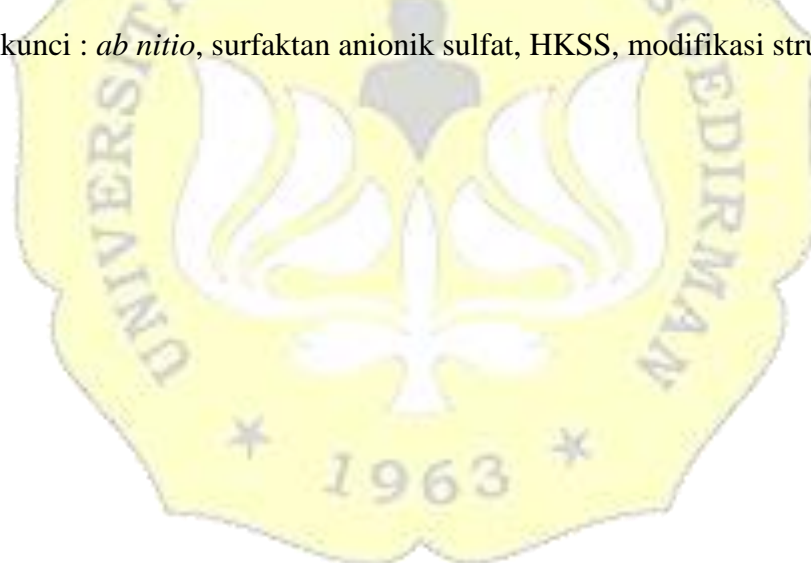


ABSTRAK

Surfaktan anionik merupakan zat aktif permukaan yang banyak digunakan dalam industri sebagai agen pembersih rumah tangga seperti detergen dan sabun. Salah satu jenis surfaktan anionik yang diaplikasikan secara luas adalah kelompok sulfat. Penggunaan surfaktan anionik dengan konsentrasi yang tinggi akan menimbulkan dampak negatif, terutama pencemaran lingkungan. Penelitian ini berfokus pada modifikasi struktur surfaktan anionik sulfat dengan model persamaan HKSS terbaik untuk mendapatkan struktur dengan nilai Konsentrasi Misel Kritik (KMK) yang lebih baik. Modifikasi struktur dilakukan menggunakan komputer dengan metode *ab initio* 6-31G**. Terdapat dua struktur molekul yang akan dimodifikasi, yaitu $C_{16}SO_4Na$ dan $C_{12}EO_4SO_4Na$. Berdasarkan persamaan HKSS, pada penelitian ini didapatkan 8 senyawa prediksi dengan nilai KMK lebih baik dibandingkan senyawa sebelumnya, dengan KMK terendah sebesar 0,000059 $\square \square \square / \square$ dan 0,00038 $\square \square \square / \square$. Senyawa prediksi yang dihasilkan mempunyai kemungkinan yang cukup besar untuk disintesis dengan reaksi sederhana yang terjadi pada karbon alfa.

Kata kunci : *ab initio*, surfaktan anionik sulfat, HKSS, modifikasi struktur, KMK



ABSTRACT

Anionic surfactants are surface active agents that are widely used in industry as a household cleaning agent such as detergents and soaps. One of the most widely applied of anionic surfactants is the sulfate group. The use of anionic surfactants with high concentrations will cause negative impacts, especially environmental pollution. This research focuses on the modification of the structure of the sulfate group surfactants with the best QSPR equation model to obtain a structure with a better Critical Micelle Concentration (CMC) value. Structure modification was performed using a computer by *ab initio* method and 6-31G** basis set. There were two molecular structures to be modified, namely $C_{16}SO_4Na$ and $C_{12}EOSO_4Na$. Based on the QSPR model, this research designed 8 predicted compounds with better CMC values than the previous compounds, which resulted the lowest CMC 0.000059 $\square \square \square / \square$ and 0.00038 $\square \square \square / \square$. These predicted compounds have a good possibility to be synthesized by a simple reaction toward alpha carbon.

Key words: *ab initio*, sulfate anionic surfactant, QSPR, structure modification, CMC

