

ABSTRAK

Surfaktan adalah zat yang ditambahkan pada cairan seperti detergen. Detergen umumnya merupakan surfaktan anionik. Parameter untuk mengetahui kinerja surfaktan yaitu Konsentrasi Misel Kritis (KMK). Penelitian ini memiliki tujuan untuk memprediksi QSPR persamaan matematika dari surfaktan anionik sulfat. Penelitian dilakukan dengan memodelkan senyawa surfaktan anionik sulfat ke model tiga dimensi, dioptimasi dengan *Hyperchem* 8.0 pada metode perhitungan *ab initio* dengan himpunan basis *Large* (6-31G**), serta perhitungan deskriptor yang akan dianalisis dengan *Multiple Linear Regression* (MLR) menggunakan SPSS versi 25.0. Analisis MLR menggunakan dua jenis senyawa yaitu senyawa *fitting* dan senyawa uji.

Nilai terbesar dari setiap deskriptor yaitu pada muatan atom C_{polar} sebesar 0,2361 C, muatan atom C_{nonpolar} sebesar -0,3331 C, polarisabilitas sebesar 37,78 Å, momen dipol sebesar 11,0394 D, indeks refraksi sebesar 100,26 Å³, koefisien partisi n-oktanol-air sebesar 8,68, berat molekul sebesar 386,57 s.m.a, volume Van der Waals sebesar 1241,99 Å³, dan luas permukaan Van der Waals sebesar 747,57 Å². Kualitas statistik metode *backward* yang didapat yaitu $r = 0,995$; $r^2 = 0,990$; $SE = 0,09888$; $F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}} = 2,80049$ pada model ketiga. Variabel tak bebas yaitu Log KMK. Variabel bebas yaitu Log P, volume Van der Waals, Luas permukaan Van der Waals, momen dipol, $q.C_{\text{polar}}$, $q.C_{\text{nonpolar}}$. Hasil perhitungan dengan parameter statistik diperoleh $n = 13$; $r = 0,950$; $r^2 = 0,902$; $SE = 0,31105$; $F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}} = 2,138286$; $PRESS = 0,612894$.

Kata kunci : *ab initio*, himpunan basis *Large* (6-31G**), KMK, surfaktan anionik sulfat.

ABSTRACT

Surfactants are substances that are added to liquids such as detergents. Detergents are generally anionic surfactants. The parameter to determine the performance of surfactants is the Critical Micelle Concentration (CMC). This study aims to predict the QSPR mathematical equation of anionic sulfate surfactant. The study was conducted by modeling anionic sulfate surfactant compounds into a three-dimensional model. This research optimized by Hyperchem 8.0 on the *ab initio* calculation method with Large basis set (6-31G **). The descriptor calculation of this research that will be analyzed by Multiple Linear Regression (MLR) using SPSS version 25.0. MLR analysis uses two types of compounds, namely fitting compounds and test compounds.

The highest value of each descriptor is C_{polar} atomic charge of 0.2361 C, $C_{nonpolar}$ atomic charge is -0.33331 C, polarizability is 37.78 Å, dipole moment is 11.0394 D. The value of refractive index is 100.26 Å³, coefficient n-octanol-water partition of 8.68, molecular weight of 386.57 s.m.a, Van der Waals volume of 1241.99 Å³, and Van der Waals surface area of 747.57 Å². The statistical qualities of the backward method obtained are $r = 0.995$; $r^2 = 0.990$; $SE = 0.09888$; $F_{count}/F_{table} = 2.80049$ in the third model. The dependent variable is Log KMK. The independent variables are Log P, Van der Waals volume, Van der Waals surface area, dipole moment, $q.C_{polar}$, $q.C_{nonpolar}$. Calculation results obtained with statistical parameters are $n = 13$; $r = 0.950$; $r^2 = 0.902$; $SE = 0.31105$; $F_{count}/F_{table} = 2.138286$; $PRESS = 0.612894$.

Keywords: *ab initio*, basis sets Large (6-31G **), CMC, anionic sulfate surfactant.