

## DAFTAR ISI (CONTENTS) :

- Himpunan maksimal faktor-1 dengan daun tak terhubung berdefisiensi tiga. *On maximal sets of 1-factors having disconnected leaves of deficiency three.* Sugeng Mardiyono, (60-65).
- Pemodelan penentuan keasaman dan kebasaan suatu molekul menggunakan sistem Fuzzy berdasarkan data muatan H dan N yang diperoleh dari metode Semiempirik. *The modeling of determination of acidity and basicity of molecules using Fuzzy system based on the data of charges on H and N that obtained from Semiempirical method.* Agus maman Abadi & Suwardi, (66-74).
- Pendekatan konstruktif untuk optimalisasi aktivitas *hands-on* IPA melalui strategi *do-talk-do*. *Constructive approach to optimal hands-on science activity by do-talk-do strategy.* Zuhdan K. Prasetyo, Suparwoto, Slamet MT, Joko Sudomo, & Insih Wilujeng, (75-82).
- Simulasi numerik konfigurasi vorteks pada superkonduktor berlandaskan model Ginzburg-Landau. *Numerical simulation of vortex configuration of superconductor matter based on Ginzburg-Landau model.* Supardi, Fuad Anwar, Pekik Nurwantoro & Agung BSU, (83-91).
- Sintesis silikat-1 menggunakan kristal  $\text{Na}[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_7[\text{Si}_6\text{O}_{20}] \cdot 54\text{H}_2\text{O}$  sebagai sumber silicon. *Synthesis of silicalite-1 using  $\text{Na}[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_7[\text{Si}_6\text{O}_{20}] \cdot 54\text{H}_2\text{O}$  crystal as silicon source.* Hari Sutrisno, (92-103).
- Eksplorasi senyawa kimia yang berkhasiat sebagai antihepatotoksik dari beberapa spesies *Hopea* (*Dipterocarpaceae*) Indonesia. *The exploration of antihepatotoxic compounds from some Hopea species (Dipterocarpaceae) Indonesia.* Sri Atun, Nurfina Aznam & Retno Arianingrum, (104-114).
- Efek jarak tanam dan varietas terhadap distribusi cahaya dalam kanopi dan pertumbuhan (biomasa) kedelai. *The effect of the planting distance and varieties on the sun ray distribution in canopy and the growth (biomass) soybean.* Djukri, (115-122)
- Upaya peningkatan kualitas penilaian mengarah ke model *authentic assessment*. *The effort for improving of assessment quality referring to authentic assessment.* Bambang Subali & Paidi, (123-133).

Terakreditasi sebagai Jurnal Ilmiah berdasarkan Keputusan Ditjen DIKTI Depdiknas No. 39/DIKTI/Kep/2004

# JURNAL PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN SAINS (JPMS)

ISSN: 1410-1866

**Terakreditasi sebagai Jurnal Ilmiah**

**Berdasarkan Keputusan Ditjen DIKTI Depdiknas No. 39/DIKTI/Kep/2004**

**Visi:** Menjadi media komunikasi yang mampu secara nyata memberikan sumbangan terhadap perkembangan bidang Pendidikan MIPA di Indonesia

**Misi:** Menyebarluaskan hasil penelitian dan hasil kajian dalam bidang Pendidikan MIPA.

## **Diterbitkan oleh**

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Yogyakarta

## **Ketua Penyunting:**

Prof. Suryanto, Ed.D

## **Penyunting Pelaksana:**

Prof. Suryanto, Ed.D

K.H Sugiyarto, Ph.D

Paidi, M.Si.

Dr. Hari Sutrisno

Dr. Zuhdan Kun Prasetyo, M.Ed.

Sukiya, M.Si.

Fauzan, M.Sc.

Dadan Rosana, M.Si

## **Penyunting Ahli:**

Prof. Drs. Sugeng Mardiyono, MApp.Sc., Ph.D. (UNY)

Prof. Dr. Soeparno Darmawidjaja (UGM).

Prof. Dr. Ir. Djoko Marsono (UGM)

Prof. Dr. Wuryadi, M.S. (UNY)

Dr. Yateman Ariyanto (UGM)

## **Pembantu Pelaksana:**

Drs. Yudi Sutomo

Paekan

## **Lay out**

Paidi

Hari Sutrisno

## **Alamat Dewan Penyunting:**

Kampus FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta, Karangmalang, Yogyakarta, Gedung D01

Telp. (0274) 548203, Fax. (0274) 540713

Semua artikel yang dimuat dalam Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains sepenuhnya merupakan pendapat dan tanggung jawab penulis, bukan pendapat anggota Dewan Penyunting.

## PEMODELAN PENENTUAN KEASAMAN DAN KEBASAAN SUATU MOLEKUL MENGGUNAKAN SISTEM FUZZY BERDASARKAN DATA MUATAN H DAN N YANG DIPEROLEH DARI METODE SEMIEMPIRIK

### THE MODELLING OF DETERMINATION OF ACIDITY AND BASICITY SOME MOLECULES USING FUZZY SYSTEM BASED ON THE DATA OF CHARGES ON H AND N WHICH OBTAINED FROM SEMIEMPIRICAL METHOD

Agus Maman Abadi<sup>1)</sup> dan Suwardi<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> Jurusan Pendidikan Matematika FMIPA UNY dan <sup>2)</sup> Jurusan Pendidikan Kimia FMIPA UNY

#### ABSTRAK

Tujuan penulisan artikel ini adalah untuk mendapatkan model penentuan keasaman dan kebasaaan molekul berdasarkan muatan pada H untuk kelompok asam dan muatan pada N untuk kelompok basa menggunakan analisis metode regresi linier dan sistem *fuzzy*. Berdasarkan data nilai pKa dan pKb hasil hitungan secara regresi linier maupun sistem samar kemudian dihitung besarnya selisih atau deviasi nilai pKa/pKb hitungan dengan pKa/pKb hasil eksperimen. Hasil analisis menunjukkan bahwa pemodelan dengan sistem *fuzzy* mempunyai tingkat kesalahan yang lebih kecil dibandingkan pemodelan dengan metode regresi linier. Kelebihan dari pemodelan dengan sistem *fuzzy* adalah dapat diperoleh model sesuai dengan tingkat kesalahan yang diinginkan dengan cara memilih parameter yang sesuai pada model sistem *fuzzy* tersebut.

Kata kunci: sistem *fuzzy*, regresi linier, keasaman, kebasaaan

#### ABSTRACT

*The aim of this paper was to obtain a determination model of molecules acidity and basicity based on H charge for acid groups and N charge for base groups using linear regression analysis and fuzzy system. Based on charges of H and N atoms for acid and base groups, respectively, a determination model of molecules acidity and basicity was constructed using fuzzy system. The result of analysis indicated that the modelling used fuzzy system have errors smaller than that using linear regression. The goodness of fuzzy system over the regression model was that the fist one able to obtain model with minimum error level through the choice of certain parameter in fuzzy system.*

*Key words: fuzzy system, linear regression, acidity, basicity*

#### PENDAHULUAN

Penentuan keasaman dan kebasaaan suatu molekul dapat dilakukan melalui pendekatan komputasi kimia dengan metode semiempirik. Perhitungannya dilakukan dengan menggunakan program Hyperchem Pro 6. Untuk menentukan keasaman dan kebasaaan suatu molekul asam maupun basa dapat dilakukan terlebih dulu dengan menentukan muatan parsial pada atom H kelompok molekul asam dan N molekul basa. Data yang diperoleh dikumpulkan dan

selanjutnya diolah melalui metode regresi linier sehingga diperoleh grafik linier muatan H lawan pKa atau muatan N lawan pKb. Berdasarkan grafik-grafik ini, kita dapat mengestimasi pKa atau pKb suatu molekul jika muatan H atau N diketahui. Muatan-muatan suatu molekul tersebut diperoleh melalui pendekatan komputasi kimia menggunakan program Hyperchem pro 6. Berdasarkan penelitian sebelumnya, yaitu pengolahan data menggunakan metode regresi linier masih

diperoleh data selisih nilai pKa hasil perhitungan berdasar persamaan regresi linier dengan pKa hasil eksperimen cukup besar. Untuk itu, kami membahas metode lain dalam pengolahan data dimaksud. Metode yang digunakan dalam hal ini adalah metode sistem samar (*fuzzy*).

Sistem *fuzzy* dapat digunakan untuk memodelkan suatu permasalahan jika diketahui sampel data dengan sembarang ketepatan (Wang, 1997). Di dalam pemodelan, yang harus diperhatikan adalah bagaimana model tersebut bisa mewakili data sampel dan data diluar sampel dengan tingkat kesalahan yang sesuai dengan yang diinginkan. Oleh karena itu dalam tulisan ini akan dikaji tentang perbandingan tentang pemodelan keasaman dan kebasaaan suatu molekul dengan sistem *fuzzy* dan meode semiempirik.

**Sistem samar**

Sistem *fuzzy* (*fuzzy system*) adalah sistem yang berbasis aturan atau pengetahuan (*knowledge-based or rule-based systems*). Basis aturan *fuzzy* terdiri dari sekumpulan aturan IF – THEN *fuzzy* yaitu “IF  $x_1$  adalah  $A_1^l$  dan  $x_2$  adalah  $A_2^l$  dan .... dan  $x_n$  adalah  $A_n^l$ , THEN  $y$  adalah  $B^l$  (1)

dengan  $A_i^l, B^l$  berturut-turut adalah himpunan *fuzzy* di  $U_i \subset \mathbf{R}$  dan  $V \subset \mathbf{R}$ , ( $x_1, x_2, \dots, x_n$ ) dan  $y$  berturut-turut adalah variabel input dan output dari sistem *fuzzy* tersebut,  $l = 1, 2, \dots, N$  yaitu banyaknya aturan dalam basis aturan *fuzzy*.

Suatu sistem *fuzzy* akan memetakan suatu bilangan riil ke suatu bilangan riil melalui fuzzifikasi, mesin inferensi *fuzzy* dan defuzzifikasi. Jika ada  $N$  pasang *input-output* ( $x_0^l, y_0^l$ ),  $l = 1, 2, 3, \dots, N$ , untuk  $N$  kecil, maka suatu sistem *fuzzy* yang dibentuk dengan basis aturan *fuzzy* (1), fuzzifikasi singleton, mesin inferensi pergandaan, , defuzzifikasi rata-rata pusat yang sesuai dengan semua pasang *input-output* tersebut adalah sebagai berikut:

$$f(x) = \frac{\sum_{l=1}^N y_0^l \exp\left(-\frac{|x - x_0^l|^2}{\sigma^2}\right)}{\sum_{l=1}^N \exp\left(-\frac{|x - x_0^l|^2}{\sigma^2}\right)} \quad (2)$$

dengan  $y_0^l$  adalah pusat dari himpunan *fuzzy*  $B^l$

dan  $\mu_{A_i^l}(x_i) = \exp\left(-\frac{|x_i - x_{0i}^l|^2}{\sigma^2}\right)$  adalah fungsi

keanggotaan Gaussian dari himpunan *fuzzy*  $A_i^l$ .

Pemilihan jenis sistem ini karena perhitungannya yang sederhana dan kekontinuannya (Karyati, 2003).

Telah dibuktikan (Agus, 2004) bahwa untuk setiap  $\varepsilon > 0$ , terdapat  $\sigma^* > 0$  sehingga sistem *fuzzy* (2) dengan  $\sigma = \sigma^*$  mempunyai sifat  $|f(x_0^l) - y_0^l| < \varepsilon$ , untuk  $l = 1, 2, \dots, N$ .

Hal ini berarti untuk sembarang tingkat keakuratan  $\varepsilon$ , selalu dapat dicari  $\sigma$  sehingga  $|f(x_0^l) - y_0^l| < \varepsilon$ , untuk  $l = 1, 2, \dots, N$ . Semakin

kecil  $\sigma$ , semakin kecil kesalahan  $|f(x_0^l) - y_0^l|$

tetapi grafik  $f(x)$  menjadi tidak halus. Jika grafik  $f(x)$  tidak halus, maka  $f(x)$  mungkin tidak dapat digunakan untuk mengeneralisasi data-data diluar sampel. Oleh karena itu perlu dicari  $\sigma$  sehingga  $f(x)$  dapat mewakili data-data diluar sampel dan juga meminimalkan kesalahan dari data-data sampel.

**DISKUSI**

**Langkah-langkah pemodelan dengan sistem *fuzzy***

Selanjutnya sistem samar (2) akan digunakan untuk memodelkan hubungan antara muatan pada H dengan pKa dan hubungan muatan pada N dengan pKb.

Data-data tentang muatan pada H dan pKa eksperimen dari kelompok asam asetat, kelompok asam benzoat dan kelompok fenol berturut-turut diberikan pada tabel 1, tabel 2 dan tabel 3. Sedangkan data-data tentang muatan pada N dan pKb eksperimen dari kelompok basa anilin diberikan pada tabel 4.

Selanjutnya muatan pada H sebagai input dan pKa eksperimen sebagai output dari sistem samar (2) sehingga untuk kelompok asam asetat terdapat 8 pasang data input-output, kelompok asam benzoat ada 11 pasang data input-output dan kelompok fenol ada 9 pasang data input-output. Dengan cara yang sama muatan pada N dipandang sebagai input dan

pKb eksperimen sebagai output dari sistem samar (2) sehingga untuk kelompok basa anilin terdapat 9 pasang data input-output.

Setiap pasang data menentukan satu aturan samar dengan pusat dari himpunan samar  $B^I$  adalah pKa dan pKb eksperimen.

### Kelompok asam asetat

Tabel 1: Data pKa hitungan-regresi linier dan eksperimen serta deviasinya untuk kelompok asam asetat

NO	asam	Muatan pada H	pKa eksperimen	pKa hitungan-regresi linier	Nilai mutlak deviasi pKa eksp. dan pKa hitungan
1	asetat	0,2269	4,76	4,75409	0,01
2	kloroasetat	0,2303	2,87	3,07483	0,20
3	dikloroasetat	0,2332	1,26	1,64252	0,38
4	trikloroasetat	0,2357	0,63	0,40777	0,22
5	butanoat	0,2273	4,82	4,55653	0,26
6	2-klorobutanoat	0,2296	2,86	3,42056	0,56
7	3-klorobutanoat	0,2300	4,05	3,2230	0,83
8	4-klorobutanoat	0,2270	4,53	4,7047	0,17

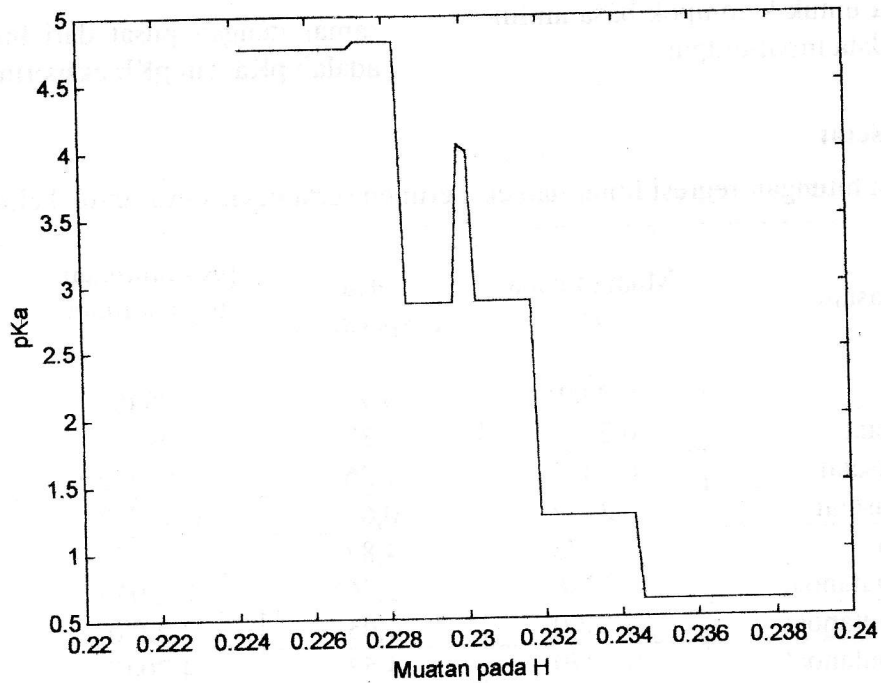
Untuk  $\sigma^2 = 0.00000001$ ,  $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7) = (0,2269; 0,2303; 0,2332; 0,2357; 0,2273; 0,2296; 0,2300)$  dan  $(y^1, y^2, y^3, y^4, y^5, y^6, y^7) = (4,76; 2,87; 1,26; 0,63; 4,82; 2,86; 4,05)$ , maka berdasarkan sistem samar (2), model hubungan antara muatan pada H dengan pKa kelompok asam asetat adalah

$$f(x) = \frac{\sum_{l=1}^7 y^l \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)}{\sum_{l=1}^7 \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)} \quad (3)$$

Selanjutnya tabel 2 memberikan penjelasan tentang ketepatan dari  $f(x)$  dengan pKa eksperimen yang sebenarnya. Gambar 1 memberikan grafik dari persamaan (3).

Tabel 2: Gambaran tentang pKa eksperimen dan pKa dari grafik

Asam	Muatan pada H (x)	pKa Eksperimen (y)	pKa dari grafik f(x)	Selisih $ f(x) - y $
Asetat	0,2269	4,7600	4,7600	0,0000
Kloroasetat	0,2303	2,8700	2,8701	0,0001
Dikloroasetat	0,2332	1,2600	1,2600	0,0000
Trikloroasetat	0,2357	0,6300	0,6300	0,0000
Butanoat	0,2273	4,8200	4,8200	0,0000
2-klorobutanoat	0,2296	2,8600	2,8600	0,0000
3-klorobutanoat	0,2300	4,0500	4,0499	0,0001
4-klorobutanoat	0,2270	4,5300	4,7600	0,2300



Gambar 1: Grafik hubungan antara muatan pada H dan pKa asam asetat

**Kelompok asam benzoat**

Tabel 3: Data pKa hitungan-regresi linier dan eksperimen serta deviasinya untuk kelompok asam benzoat

NO	asam	Muatan pada H	pKa eksperimen	pKa hitungan-regresi linier	Nilai mutlak deviasi pKa eksp. dan pKa hitungan
1	asam benzoat	0,2287	4,20	4,231415	0,031415
2	p-nitrobenzoat	0,2343	3,44	3,421935	0,01807
3	m-nitrobenzoat	0,2344	3,49	3,40748	0,08252
4	p-klorobenzoat	0,2299	3,99	4,057955	0,067955
5	m-klorobenzoat	0,2300	3,82	4,0435	0,2235
6	p-metilbenzoat	0,2282	4,38	4,30369	0,07631
7	m-metilbenzoat	0,2284	4,27	4,27478	0,00478
8	p-metoksibenzoat	0,2281	4,48	4,318145	0,16186
9	m-metoksibenzoat	0,2285	4,09	4,260325	0,170325
10	p-hidroksibenzoat	0,2284	4,59	4,27478	0,31522
11	m-hidroksibenzoat	0,2287	4,08	4,231415	0,151415

Untuk  $\sigma^2 = 0.00000001$ ,

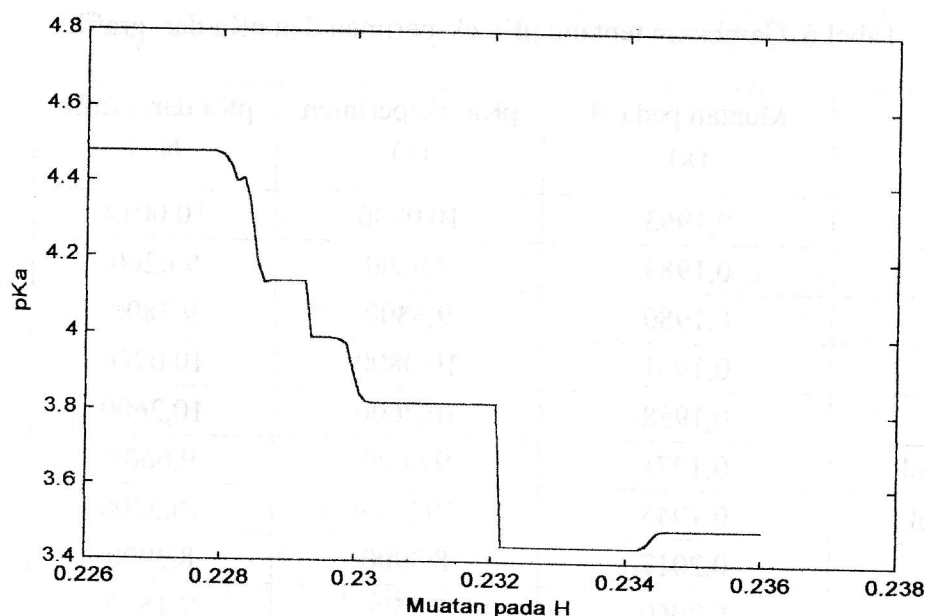
$(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9, x_{10}, x_{11}) = (0,2287;$   
 $0,2343; 0,2344; 0,2299; 0,2300; 0,2282; 0,2284;$   
 $0,2281; 0,2285; 0,2284; 0,2287)$  dan  $(y^1, y^2, y^3,$   
 $y^4, y^5, y^6, y^7, y^8, y^9, y^{10}, y^{11}) = (4,20; 3,44; 3,49;$   
 $3,99; 3,82; 4,38; 4,27; 4,48; 4,09; 4,59; 4,08),$   
 maka berdasarkan sistem samar (2), model  
 hubungan antara muatan pada H dengan pKa  
 kelompok asam benzoat adalah

$$g(x) = \frac{\sum_{l=1}^{11} y^l \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)}{\sum_{l=1}^{11} \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)} \quad (4)$$

Selanjutnya tabel 4 memberikan penjelasan tentang ketepatan dari  $g(x)$  dengan pKa eksperimen yang sebenarnya. Gambar 2 memberikan grafik dari persamaan (4).

Tabel 4: Gambaran tentang pKa eksperimen dan pKa dari grafik

Asam	Muatan pada H (x)	pKa Eksperimen (y)	pKa dari grafik g(x)	Selisih $ g(x) - y $
Asam benzoat	0,2287	4,2000	4,1396	0,0604
p-nitrobenzoat	0,2343	3,4400	3,4534	0,0134
m-nitrobenzoat	0,2344	3,4900	3,4766	0,0134
p-klorobenzoat	0,2299	3,9900	3,9443	0,0457
m-klorobenzoat	0,2300	3,8200	3,8657	0,0457
p-metilbenzoat	0,2282	4,3800	4,4075	0,0275
m-metilbenzoat	0,2284	4,2700	4,3772	0,1072
p-metoksibenzoat	0,2281	4,4800	4,4531	0,0269
m-metoksibenzoat	0,2285	4,0900	4,2322	0,1422
p-hidrosibenzoat	0,2284	4,5900	4,3772	0,2128
m-hidrosibenzoat	0,2287	4,0800	4,1396	0,0596



Gambar 2: Grafik hubungan muatan pada H dengan pKa asam benzoat

**Kelompok fenol**

Tabel 5: Data pKa hitungan-regresi linier dan eksperimen serta deviasinya untuk kelompok fenol

NO	Asam	Muatan pada H	pKa eksperimen	pKa hitungan-regresi linier	Nilai mutlak deviasi pKa eksp. dan pKa hitungan
1	Fenol	0,1963	10,00	9,892055	0,10794
2	m-klorofenol	0,1983	9,02	9,321755	0,301755
3	p-klorofenol	0,1980	9,38	9,4073	0,0273
4	m-metilfenol	0,1961	10,08	9,949085	0,13091
5	p-metilfenol	0,1958	10,26	10,03463	0,23
6	m-metoksifenol	0,1971	9,66	9,663935	0,003935
7	p-metoksifenol	0,1945	10,21	10,405325	0,195325
8	m-nitrofenol	0,2017	8,39	8,352245	0,03775
9	p-nitrofenol	0,2060	7,15	7,1261	0,0239

Untuk  $\sigma^2 = 0.00000001$ ,  
 $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9) = (0,1963; 0,1983; 0,1980; 0,1961; 0,1958; 0,1971; 0,1945; 0,2017; 0,2060)$   
 dan  $(y^1, y^2, y^3, y^4, y^5, y^6, y^7, y^8, y^9) = (10,00; 9,02; 9,38; 10,08; 10,26; 9,66; 10,21; 8,39; 7,15)$ , maka berdasarkan sistem samar (2), model hubungan antara muatan pada H dengan pKa kelompok fenol adalah

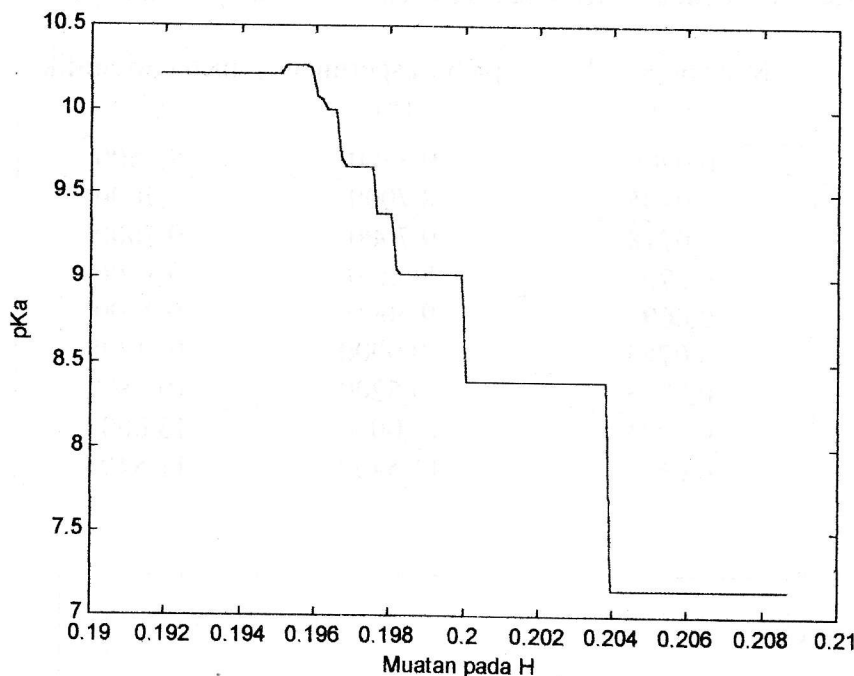
$$h(x) = \frac{\sum_{l=1}^9 y^l \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)}{\sum_{l=1}^9 \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)} \quad (5)$$

Selanjutnya tabel 6 memberikan penjelasan tentang ketepatan dari  $h(x)$  dengan pKa eksperimen yang sebenarnya. Gambar 3 memberikan grafik dari persamaan (5).

Tabel 6: Gambaran tentang pKa eksperimen dan pKa dari grafik

Asam	Muatan pada H (x)	pKa Eksperimen (y)	pKa dari grafik $h(x)$	Selisih $ h(x) - y $
Fenol	0,1963	10,0000	10,0014	0,0014
m-klorofenol	0,1983	9,0200	9,0200	0,0000
p-klorofenol	0,1980	9,3800	9,3800	0,0000
m-metilfenol	0,1961	10,0800	10,0786	0,0014
p-metilfenol	0,1958	10,2600	10,2600	0,0000
m-metoksifenol	0,1971	9,6600	9,6600	0,0000
p-metoksifenol	0,1945	10,2100	10,2100	0,0000
m-nitrofenol	0,2017	8,3900	8,3900	0,0000
p-nitrofenol	0,2060	7,1500	7,1500	0,0000





Gambar 3: Grafik hubungan muatan pada H dengan pKa fenol

**Kelompok basa anilin**

Tabel 7: Data pKb hitungan-regresi linier dan eksperimen serta deviasinya untuk kelompok basa anilin

NO	Asam	Muatan pada N	pKb eksperimen	pKb hitungan-regresi linier	Nilai mutlak Deviasi pKb eksp. dan pKb hitungan
1	Anilin	0,0709	9,38	9,683117	0,303117
2	p-metoksianilin	0,0705	8,70	9,642665	0,942665
3	m-metoksianilin	0,0718	9,70	9,774134	0,074134
4	p-metilanilin	0,0709	8,92	9,683117	0,763117
5	m-metilanilin	0,0698	9,30	9,571874	0,271874
6	p-kloroanilin	0,0754	10,00	10,138202	0,138202
7	m-kloroanilin	0,0753	10,52	10,128089	0,39191
8	p-nitroanilin	0,1031	13,00	12,939503	0,0605
9	m-nitroanilin	0,0691	11,54	9,501083	2,03892

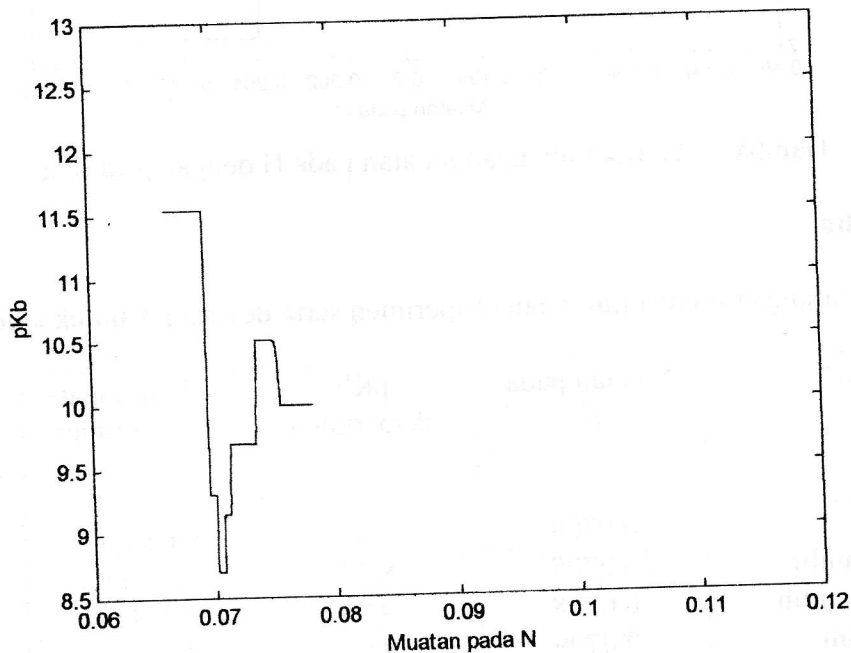
Untuk  $\sigma^2 = 0.00000001$ ,  $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9) = (0,0709; 0,0705; 0,0718; 0,0709; 0,0698; 0,0754; 0,0753; 0,1031; 0,0691)$  dan  $(y^1, y^2, y^3, y^4, y^5, y^6, y^7, y^8, y^9) = (9,38; 8,70; 9,70; 8,92; 9,30; 10,00; 10,52; 13,00; 11,54)$ , maka berdasarkan sistem samar (2), model hubungan antara muatan pada N dengan pKb kelompok basa anilin adalah

$$q(x) = \frac{\sum_{l=1}^9 y^l \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)}{\sum_{l=1}^9 \exp\left(-\frac{(x-x_l)^2}{\sigma^2}\right)} \quad (6)$$

Selanjutnya tabel 8 memberikan penjelasan tentang ketepatan dari  $q(x)$  dengan pKb eksperimen yang sebenarnya. Gambar 4 memberikan grafik dari persamaan (6).

Tabel 8: Gambaran tentang pKb eksperimen dan pKb dari grafik

Basa	Muatan pada H (x)	pKb Eksperimen (y)	pKb dari grafik q(x)	Selisih $ q(x) - y $
Anilin	0,0709	9,3800	9,1500	0,2300
p-metoksianilin	0,0705	8,7000	8,7000	0,0000
m-metoksianilin	0,0718	9,7000	9,7000	0,0000
p-metilanilin	0,0709	8,9200	9,1500	0,2300
m-metilanilin	0,0698	9,3000	9,3000	0,0000
p-kloroanilin	0,0754	10,0000	10,1398	0,1398
m-kloroanilin	0,0753	10,5200	10,3802	0,1398
p-nitroanilin	0,1031	13,0000	13,0000	0,0000
m-nitroanilin	0,0691	11,5400	11,5400	0,0000



Gambar 4: Grafik hubungan muatan pada N dengan pKb basa anilin

Telah diketahui bahwa muatan parsial pada atom H dan N berhubungan dengan keasaman dan kebasaan suatu molekul. Berdasarkan grafik yang diperoleh menggunakan metode regresi linier dan system samar, maka dapat ditentukan deviasi penentuan keasaman dan kebasaan melalui komputasi dengan hasil eksperimen.

Pemodelan *fuzzy* untuk keasaman dan kebasaan molekul didasarkan pada data pKa dan pKb eksperimen serta muatan pada H dan N. Berdasarkan data ini dibuat sistem fuzzy yang merupakan model untuk memperkirakan

keasaman dan kebasaan suatu molekul. Pemilihan  $\sigma$  yang sesuai harus dilakukan untuk mendapatkan model dengan tingkat kesalahan yang diinginkan. Pemilihan  $\sigma$  ini dilakukan dengan coba-coba. Selanjutnya perlu diteliti tentang pemilihan  $\sigma$  secara analisis.

Berdasarkan hasil pengolahan data, ternyata selisih  $|q(x) - y|$  yaitu Nilai deviasi pKb /pKa eksperimen dan pKb/pKa hitungan yang diperoleh melalui metode samar secara umum lebih kecil daripada nilai deviasinya yang diperoleh melalui metode regresi linier.

## SIMPULAN DAN SARAN

Simpulan yang dapat ditarik dari pembahasan adalah bahwa penentuan keasaman dan kebasaaan kelompok asam dan basa dapat dilakukan melalui pendekatan kimia komputasi dengan program Hyperchem pro 6. Penentuan tersebut dilakukan melalui pengolahan data menggunakan metode regresi linier dan sistem samar (*fuzzy*). Hasil pengolahan melalui metode sistem *fuzzy* ternyata memiliki tingkat kesalahan minimum dibanding dengan metode regresi linier.

## DAFTAR PUSTAKA

Agus Maman Abadi. (2004). *Konstruksi sistem samar dengan menggunakan pengelompokan persekitaran terdekat*. Seminar Nasional Penelitian, Pendidikan dan Penerapan MIPA yang diselenggarakan oleh FMIPA UNY pada tanggal 2 Agustus 2004 di Hotel Sahid Raya Yogyakarta.

Currie, J. (1993). *Estimating pKa*. Oregon: CACHE Scientific.

Karyati, dkk. (2003). *Konstruksi fuzzifier dan defuzzifier suatu sistem samar*. Laporan Research Grant Due-Like Jurusan Pendidikan Matematika FMIPA UNY Yogyakarta

Tugawin, R.J., Bacala, A.M., Dahili, A.S., & Vequizo, R.M. (2000). *A semiempirical Study on The structure of polyaniline dimer*. Illigan City: MSU-Iligan Institute.

Wang., LX. (1997). *A course in fuzzy systems and control*. Upper Saddle River-New Jersey : Prentice-Hall, Inc.

Yoshida., H. (2003). *Journal of Computational Chemistry*, 2(4). 143-148.

**PETUNJUK PENULISAN ARTIKEL JPMS**

1. Artikel yang dimuat berupa hasil penelitian atau hasil kajian dalam bidang Pendidikan Matematika dan Sains. Artikel tersebut belum atau tidak sedang diproses untuk dipublikasikan pada jurnal atau berkala lain (diperkuat dengan surat pernyataan). Bila telah disajikan dalam forum seminar, harus disebutkan nama, tempat dan tanggal penyelenggaraan seminarnya.
2. Artikel ditulis dalam Bahasa Indonesia atau Bahasa Inggris, diketik dengan program *MS-Word* huruf *Times New Roman* font 12, jarak 2 spasi. Panjang naskah maksimum 15 halaman kuarto. Naskah dikirim rangkap 3, melalui pos atau diserahkan langsung ke alamat Dewan Penyunting. Untuk naskah yang telah disetujui untuk dimuat, penulis diharuskan mengirimkan disket berisi file artikel terevisi/terbaru beserta *print-out*nya.
3. Klasifikasi penerimaan artikel:
  - a. Diterima tanpa perbaikan.
  - b. Diterima dengan perbaikan.
  - c. Diperbaiki dan untuk dipertimbangkan kembali.
  - d. Ditolak.
4. Naskah dan kopi disket dari artikel yang tidak dapat dimuat dapat diperoleh kembali oleh penulis jika diminta.
5. Artikel hasil penelitian ditulis dengan urutan: (a) **halaman judul** yang memuat: judul penelitian (dalam Bahasa Indonesia dan Bahasa Inggris, maksimum 10 kata), nama dan alamat lengkap lembaga aviliasi penulis, abstrak (ditulis dalam 1 paragraf menggunakan Bahasa Indonesia dan Bahasa Inggris, memuat tujuan, metode serta hasil penelitian), dan disertai kata kunci (memuat karakteristik permasalahan, terdiri dari kata atau beberapa kata, panjang maksimum 1 baris); (b) **pendahuluan** (memuat latar belakang, rumusan masalah, tujuan dan manfaat penelitian); (c) **metode penelitian** (memuat rancangan, bahan/subyek penelitian, prosedur, instrumen dan teknik analisis data serta hal-hal lain yang berkaitan dengan cara penelitiannya); (d) **hasil penelitian dan pembahasan**; (e) **simpulan dan saran** atau ditambah dengan **keterbatasan penelitian** (bila ada); dan (f) **daftar pustaka**.
6. Artikel hasil kajian ditulis dengan urutan: (a) **halaman judul** yang memuat: judul kajian (dalam Bahasa Indonesia dan Bahasa Inggris, maksimum 15 kata), nama dan alamat lengkap lembaga aviliasi penulis, abstrak (ditulis dalam 1 paragraf menggunakan Bahasa Indonesia dan Bahasa Inggris, memuat tujuan, skop penulisan, serta kesimpulan hasil kajian), dan disertai kata kunci (mencerminkan karakteristik permasalahan, terdiri dari kata atau beberapa kata, dan panjang maksimum 1 baris); (b) **pendahuluan** (memuat latar belakang, rumusan masalah, tujuan dan manfaat kajian); (c) **pembahasan** (memuat analisis terhadap permasalahan yang dikaji); (d) **simpulan** atau ditambah **saran/rekomendasi** (bila ada); serta (e) **daftar pustaka**.
7. Cara penunjukan sumber acuan dalam teks:
  - a. Langsung dari penulis:
    - 1) Menurut Mitchell, dkk., (1986) ada 14 elemen yang mencerminkan perilaku kreatif, yaitu .....
    - 2) ....., dalam bentuk makro molekul makro maupun molekul mikro (Towle, 1989).
  - b. Pendapat seseorang yang telah dikutip oleh seorang penulis:
    - 1) Towle (Bambang Subali, 1994) menyatakan bahwa .....
    - 2) ....., sebagaimana yang dikemukakan oleh Towle (Bambang Subali, 1994).
  - c. Langsung dari penulis yang karyanya diedit oleh seorang editor:
    - 1) Sofian Effendi (Masri Singarimbun, 1982) menyatakan bahwa .....
    - 2) ..... merupakan hal yang penting untuk diperhatikan dalam penyusunan kurikulum, seperti dituturkan oleh King (Meyer, 1988).
8. Penulisan Daftar Pustaka:
  - a. **Dari buku teks:**
    - Daniel, T.W., Helms, J.A., & Baker, F.S. (1980). *Principles of silviculture*. New York: McGraw Hill.
    - Gronlund, N.E. & Linn, R.L. (1990). *Measurement and evaluation in teaching*. (6<sup>th</sup> ed.). New York: Macmillan.
  - b. **Dari buku teks yang dirangkum oleh editor.**
    - King, W.K. (1988). The Caribbean region. Dalam G.R. Meyer (Ed.). *Overcoming constrains on the teaching of biology: A global perspective*. Jakarta: Unesco Regional Office for Science & Technology.
    - Sofian Effendi. (1982). Unsur-unsur penelitian ilmiah. Dalam Masri Singarimbun (Ed.). *Metode penelitian survei*. Jakarta: LP3ES.
  - c. **Dari buku terjemahan**
    - Daniel, W.W. 1980. *Statistika nonparametrik terapan*. (Terjemahan Tri Kuntjoro). Jakarta : Gramedia.
  - d. **Dari skripsi/tesis/desertasi**
    - Paidi. (1999). *Induksi Planlet Poliploid pada kultur in vitro tunas lateral pisang emas (*Musa acuminata* cv. emas) dengan perlakuan kolikhisin*. Tesis magister S<sub>2</sub> yang tidak dipublikasikan. Yogyakarta: Universitas Gadjah Mada.
  - e. **Dari jurnal:**
    - f. Asri Budiningsih. (1995). Intensitas penggunaan media IPA di sekolah dasar. *Jurnal Kependidikan*, XXV (1), 23-30.
    - Princhar, P.E. (1992). Studies on the bread-improving mechanism of fungal alpha-amylase. *Journal of Biological Education*, 26 (1), 14-17.
  - f. **Dari kumpulan abstrak penelitian atau proceeding:**
    - Paidi. (2002). Evaluasi alternatif untuk pembelajaran sains dalam rangka antisipasi pelaksanaan Kurikulum Berbasis Kompetensi. *Prosiding seminar dan Musyawarah Nasional IKA UNY dalam rangka Dies Natalis UNY ke 38, 6 Juli 2002*. Yogyakarta: Universitas Negeri Yogyakarta.
    - Giaquinta, R.T., Quebedeaux, B., Sadler, N.L., & Franceschi, V.R. (1984). Assimilate partitioning in soybean leaves during seed filling. Dalam R. Shibles, (Ed.). *Word soybean research conference III: Proceedings*. (pp. 729-738). Iowa: Iowa State University.
  - g. **Dari internet**
    - Gluckauf, R.L., Whitton, J., Bazter, J., Kain, J. & Hudson, M. (Juli, 1998). Videocounseling for families of rural teens with epilepsy. *Telehealth News*, 2(2). Diambil pada tanggal 6 Juni 2002, dari <http://www.telehealth.net/subscribe/newsletter--4.html#1>

NB: Untuk hal-hal lain yang belum tercantum dalam pedoman penulisan daftar pustaka ini, bisa dilihat pada *Publication Manual of the American Psychological Association*, edisi IV atau V.