

INTISARI

Adanya berbagai substituen pada suatu senyawa akan mengakibatkan perubahan sifat fisika kimianya sehingga lipofilisitasnya juga berubah. Parameter lipofilisitas yang dibahas dalam penelitian ini adalah log P dan R_M .

Penelitian ini selain bertujuan untuk menentukan hubungan antara R_M dan log P benzofenon serta turunannya, juga bertujuan untuk mencari hubungan antara R_M hasil ekstrapolasi ke 100% air dan log P agar diperoleh slope mendekati satu.

Log P benzofenon dan 15 turunannya dihitung secara teoritis menggunakan sistem tetapan hidrofobik pecahan menurut Rekker. Penentuan harga R_M dilakukan secara kromatografi lapis tipis fase terbalik menggunakan fase diam parafin cair, fase gerak campuran aseton:air = (75:25, 70:30, 65:35, 60:40, 55:45, dan 50:50) v/v, serta detektor sinar ultra violet dengan panjang gelombang 254 nm.

Hasil analisis regresi antara log P dan R_M benzofenon serta turunannya untuk tiap kombinasi fraksi volume fase gerak merupakan persamaan yang signifikan.

Hubungan antara R_M terekstrapolasi ke 100% air dan log P untuk benzofenon serta turunannya adalah :

$$\text{Log P} = (1,3489 \pm 0,0786) R_{M \text{ ext}} + 0,4853$$

$$n = 16 \quad r = 0,9771 \quad F = 294,780 \quad s = 0,2120$$

Secara statistik slope berbeda nyata dari satu. Hal ini dapat diperkirakan karena posisi substituen yang berbeda-beda.



Untuk benzofenon dan turunannya yang memiliki substituen pada posisi para diperoleh persamaan :

$$\text{Log } P = (1,1574 \pm 0,1541) R_{M \text{ ext}} + 0,9313$$

$$n = 6 \quad r = 0,9663 \quad F = 56,373 \quad s = 0,2163$$

Secara statistik slope tidak berbeda nyata dari satu.

Pengaruh posisi substituen terhadap lipofilisitas senyawa diteliti lebih lanjut dengan perhitungan harga $(f(\text{CH}_3)-f(\text{H}))$ dan $(f(\text{Cl})-f(\text{H}))$. Ternyata terdapat perbedaan antara hasil perhitungan dengan harga teoritis, selain itu didapatkan bahwa hasil perhitungan $(f(\text{CH}_3)-f(\text{H}))_o$ berbeda dari $(f(\text{CH}_3)-f(\text{H}))_p$.

Dapat disimpulkan bahwa hubungan antara log P dan R_M benzofenon serta turunannya berupa garis lurus, selain itu dapat disimpulkan pula bahwa posisi substituen mempengaruhi besarnya lipofilisitas senyawa.