

## Penentuan Metode Semiempirik untuk Insektisida Turunan Sulfenil Metilkarbamat

*Rini Selly*

### Abstrak

Penelitian ini bertujuan sebagai uji pendahuluan HKSA (Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas) dalam pemilihan metode semiempirik yang tepat bagi senyawa insektisida. Senyawa yang dijadikan dasar untuk penelitian adalah senyawa insektisida turunan sulfenil metilkarbamat. Senyawa turunan sulfenil metilkarbamat diperoleh dari literatur. Metode semiempirik yang dibandingkan adalah CNDO, INDO, MNDO, AM1 dan PM3. Pemilihan metode didasarkan pada perbandingan data panjang ikatan, sudut ikatan dan sudut torsi hasil perhitungan komputasi dengan hasil eksperimen yang diperoleh dari literatur. Perbedaan pada sudut torsi terutama pada atom O3-C11-O2-C1, dimana selisih AM1 dengan data eksperimen sebesar 1,461 poin menyimpulkan bahwa metode yang paling tepat digunakan untuk perhitungan secara komputasi terhadap insektisida senyawa turunan sulfenil metilkarbamat adalah metode AM1.

*Kata Kunci : Insektisida; sulfenil metilkarbamat; semiempirik*

## PENDAHULUAN

Insektisida merupakan salah satu jenis pestisida yang berasal dari bahan-bahan kimia yang bersifat racun yang dikhususkan untuk membunuh serangga. Senyawa insektisida perlu terus dikembangkan karena pada dasarnya serangga yang tidak mati pada saat terkena insektisida ini akan menjadi resisten atau mampu beradaptasi terhadap senyawa insektisida yang ada sehingga walaupun insektisida diberikan terus menerus serangga tidak akan mati.

Kimia komputasi termasuk kajian teoritik yang mendukung perkembangan teori-teori ilmu kimia, kajian kimia komputasi terhadap suatu sistem kimia diawali dengan langkah pemodelan sistem yang akan dikaji, dilanjutkan dengan perhitungan sifat fisikokimia, diakhiri dengan analisis data yang dihasilkan dari perhitungan. Jika data eksperimen tersedia, hasil yang diperoleh melalui kajian teori kimia komputasi bisa dibandingkan dengan data-data percobaan. Jika tidak tersedia data eksperimen, maka pemilihan metode yang tepat akan menentukan hasil kajian itu. (Jensen, 2007).

Untuk mendapatkan metode perhitungan muatan bersih atom yang paling sesuai, dilakukan pemodelan molekul senyawa turunan sulfenil metilkarbamat menggunakan berbagai metode. Struktur senyawa utama dihitung muatan bersih atom-atom penyusunnya serta momen dipolnya.

Salah satu metode perhitungan yang cukup baik adalah semiempirik. (Pranowo, 2002). Perhitungan semiempirik mekanika kuantum ini meliputi tujuh metode yaitu metode Extended Huckel, Complete Neglect of Differential Overlap (CNDO), Intermediate Neglect of Differential Overlap (INDO), Modified Neglect on Diatomic Overlap (MNDO), Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap (MINDO3), Austin Model 1 (AM1) dan Parameterized Model 3 (PM3). Namun pada penelitian kali ini dibatasi hanya 5 metode semiempirik yang akan dibandingkan

Perbedaan metode semiempiris yang satu dengan yang lain terletak pada pendekatannya (misalnya tolakan core-core) dan secara khusus pada nilai dari parameter tersebut. Berbeda dengan pendekatan mekanika molekular, hanya parameter untuk atom tunggal dan untuk pasangan atom yang diperlukan. Tujuan akhir dari metode semiempiris adalah aturan untuk mengetahui bagaimana mengevaluasi setiap integral

yang terdapat pada persamaan Hartree-Fock-Roothan sehingga determinan sekuler dapat dibuat (elemen matrik) dan diselesaikan untuk orbital molekul.

Parameterisasi dari metode semiempiris ini dapat bersumber dari data eksperimen maupun dari hasil perhitungan ab initio yang lebih teliti. Itulah sebabnya harus dilakukan pemilihan metode semiempiris dengan memperhatikan golongan senyawa yang akan dianalisis.

## METODE PENELITIAN

### Materi penelitian

Pada penelitian ini digunakan data dan struktur molekul insektisida turunan sulfenil metilkarbamat dan aktivitas eksperimennya yang berasal dari Umetsu (1984) dan Umetsu dkk.(1988) yakni sejumlah 24 senyawa.

### Peralatan penelitian

Penelitian ini dikerjakan dengan menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi prosesor Pentium 4 3GHz, RAM 512 MB, Harddisk 60 GB. Adapun perangkat lunak (software) yang digunakan yaitu Hyperchem 8.0 for Windows untuk melakukan pemodelan molekul senyawa.

### Prosedur Penelitian

Senyawa yang digunakan sebagai bahan penelitian dibuat struktur 2 dimensinya menggunakan program Hyperchem. Kemudian dilakukan penambahan atom H dan pembentukan struktur 3 dimensi.

Struktur yang terbentuk dioptimasi geometrimenggunakan masing-masing metode semiempiris CNDO, INDO, MNDO, AM1 dan PM3 menggunakan algoritma Polak-Ribiere dengangradien 0,001 kkal/Å dan batas iterasi 32767 kali. Optimasi merupakan suatu metode untuk menghitung dan menampilkan struktur molekul dengan energi potensial minimum dan gaya-gaya atomik terkecil dan diharapkan merupakan representasi struktur molekul yang diadopsi senyawa tersebut di alam.

Senyawa yang telah dalam bentuk tiga dimensi tersebut kemudian diberi kode nomor dan dihitung. Data-data tentang panjang ikatan, sudut ikatan serta sudut torsi senyawa yang diperoleh dari perhitungan dengan menggunakan variasi metode semiempirik tersebut kemudian dibandingkan dengan data hasil eksperimen yang pada penelitian ini berupa data kristal.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil pemodelan dan perhitungan parameter struktur/konformasi menggunakan berbagai metode semiempirik disajikan pada tabel bersama-sama dengan data eksperimen. Perbandingan data hasil pemodelan dengan data hasil eksperimen dimaksudkan untuk mengevaluasi sejauh mana data hasil pemodelan bersesuaian dengan data eksperimen. Data panjang ikatan dan sudut torsi diperoleh dari pemodelan dengan menggunakan perbandingan berbagai metode semiempirik CNDO, INDO, MNDO, AM1 dan PM3. Dengan demikian dapat ditentukan metode semiempirik mana yang memberikan hasil perhitungan paling akurat untuk digunakan pada penelitian selanjutnya. Dari perbandingan data panjang ikatan antar atom dan sudut ikatan yang ditampilkan pada tabel 1 dan 2 tidak ditemukan perbedaan yang signifikan diantara berbagai metode semiempirik dibandingkan dengan data eksperimen. Selisih harga yang dihasilkan tidak dapat dijadikan sebagai bahan pertimbangan untuk menganalisa metode mana yang paling akurat dalam menghitung senyawa, oleh karena itu telah dilakukan perbandingan lain berupa data sudut torsi yang ditampilkan pada Tabel 3. Data sudut torsi yang dihasilkan dari perhitungan berbagai metode semiempirik memperlihatkan bahwa metode AM1 adalah metode yang paling mendekati dibandingkan dengan metode lainnya, data hasil perhitungan metode AM1 menunjukkan selisih yang kecil dengan data eksperimen laboratorium, sementara untuk metode CNDO, INDO, MNDO dan PM3 menunjukkan selisih yang cukup signifikan dengan data eksperimen, salah satu yang paling terlihat adalah nilai pada atom O3-C11-O2-C1, dimana selisih AM1 dengan data eksperimen sebesar 1,461 poin. Dari berbagai perbandingan data kristal, dapat disimpulkan bahwa metode AM1 adalah metode yang dipilih pada penelitian ini dikarenakan hasil pemodelannya lebih mendekati harga eksperimen.

## Penutup

### Kesimpulan

1) Dibandingkan dengan metode semiempirik CNDO, INDO, MNDO serta PM3, maka AM1 memiliki nilai yang paling mendekati data eksperimen.

2) Dari hasil pembahasan pada penelitian ini, maka dapat diambil kesimpulan bahwa senyawa insektisida turunan sulfenil metilkarbamat akan dapat dimodelkan dengan baik dan deskriptor-deskriptor hidrofobik, elektronik dan sterik akan dapat dihitung secara akurat dengan menggunakan metode semiempirik AM1 bila dibandingkan dengan keempat metode semiempirik lainnya.

### Saran

Dari hasil penelitian yang telah didapatkan, maka disarankan untuk dilakukan perhitungan dengan metode lain seperti ab initio untuk dikomparasikan dengan penelitian ini

## DAFTAR PUSTAKA

- Jensen, F., 2007, Introduction for Computational Chemistry, Jhon Willey & Sons, New York
- Pranowo, H. D., 2002, Kimia Komputasi, Pusat Kimia Komputasi Indonesia-Austria Kimia FMIPA UGM, Yogyakarta.
- Umetsu N., 1984, Studies on the Selectivity Toxic Derivates of Methylcarbamate Insecticides, J. Pesticide Sci, 9, 169-180.
- Umetsu N., Kawata M., Fukuto T.R., 1988, Synthesis and Biological Activity of Alkoxysulfenyl Derivates of Methylcarbamate Insecticides, J. Pesticide Sci, 13, 595-603.
- Yang, L.T., Xian F.L., Ai X.H., and Yu W., 2011, Structure Reports Bis(2,2-dimethyl-2,3-dihydro-1-benzofuran-7-yl) Carbonate, Act. Cryst., E67, O338

