

**MEKANISME RADIOLISIS PADA ACRYLIC ACID *INTERFACE* AKIBAT
RADIASI GAMMA PADA *DRUG DELIVERY SYSTEM***

SKRIPSI

Oleh:

ZAHROTUL WATHONIYAH

NIM. 220604110054



**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI MAULANA MALIK IBRAHIM
MALANG
2026**

HALAMAN PENGANTAR

**MEKANISME RADIOLISIS PADA ACRYLIC ACID *INTERFACE* AKIBAT
RADIASI GAMMA PADA *DRUG DELIVERY SYSTEM***

SKRIPSI

**Diajukan Kepada:
Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang
Untuk Memenuhi Salah Satu Persyaratan Dalam
Memperoleh Gelar Sarjana Sains (S.Si)**

**Oleh:
ZAHROTUL WATHONIYAH
NIM. 220604110054**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI MAULANA MALIK IBRAHIM
MALANG
2026**

HALAMAN PERSETUJUAN

MEKANISME RADIOLISIS PADA ACRYLIC ACID *INTERFACE* AKIBAT RADIASI GAMMA PADA *DRUG DELIVERY SYSTEM*

SKRIPSI

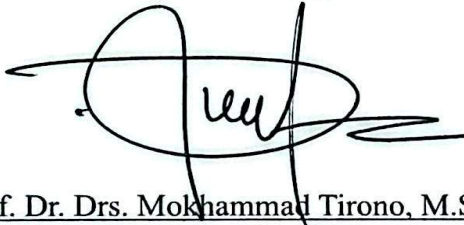
Oleh:

ZAHROTUL WATHONIYAH

NIM. 220604110054

Telah Diperiksa dan Disetujui untuk Diuji
Pada Tanggal, 03 Juni 2026

Dosen Pembimbing I



Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si

NIP. 19641211 199111 1 001

Dosen Pembimbing II



Dr. Umayyatus Syarifah, M.A

NIP. 19820925 200901 2 005

Mengetahui,

Ketua Program Studi



Farid Samsu Hananto, M.T

NIP. 19740513 200312 1 001

HALAMAN PENGESAHAN

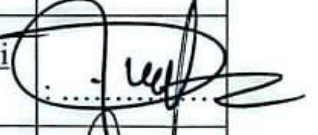
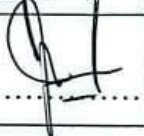
MEKANISME RADIOLISIS PADA ACRYLIC ACID *INTERFACE* AKIBAT RADIASI GAMMA PADA *DRUG DELIVERY SYSTEM*

SKRIPSI

Oleh:

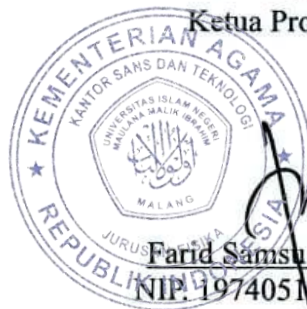
ZAHROTUL WATHONIYAH
NIM. 220604110054

Telah Dipertahankan Di Depan Dewan Penguji Skripsi
Dan Dinyatakan Diterima Sebagai Salah Satu Persyaratan
Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Sains (S.Si)
Pada Tanggal, 25 Juni 2026

Penguji Utama	<u>Dr. Agus Mulyono, M.Kes</u> NIP. 19750808 199903 1 003	
Ketua Penguji	<u>Ahmad Luthfin, M.Si</u> NIP. 19860504 201903 1 009	
Sekretaris Penguji	<u>Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si</u> NIP. 19641211 199111 1 001	
Anggota Penguji	<u>Dr. Umayyatus Syarifah, M.A</u> NIP. 19820925 200901 2 005	

Mengesahkan,

Ketua Program Studi



Farid Samsu Hananto, M.T
NIP. 19740513 200312 1 001

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : ZAHROTUL WATHONIYAH

NIM : 220604110054

Jurusan : FISIKA

Fakultas : SAINS DAN TEKNOLOGI

Judul Penelitian : Mekanisme Radiolisis Pada Acrylic Acid *Interface* Akibat Radiasi Gamma Pada *Drug Delivery System*.

Menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa hasil penelitian saya ini tidak terdapat unsur-unsur penjiplakan karya penelitian atau karya imiah yang pernah dilakukan atau dibuat oleh orang lain, kecuali yang tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar pustaka. Apabila ternyata hasil penelitian ini terbukti terdapat unsur-unsur jiplakan maka saya bersedia untuk menerima sanksi atas perbuatan tersebut.

Malang, 25 juni 2026
Yang Membuat Pertanyaan



Zahrotul Wathoniyah
NIM. 220604110054

MOTTO

“Tidak ada mimpi yang terlalu tinggi dan tidak ada mimpi yang patut diremehkan.

Lambungkan setinggi yang kau inginkan dan gapailah dengan selayaknya yang
kau harapkan”

(Maudy Ayunda)

“Sukses bukanlah angka tetap, sukses adalah proses. Setiap Langkah adalah
bagian dari perjalanan menuju keberhasilan”

(Nareswari)

“Semua jatuh bangunmu hal yang biasa, angan dan pertanyaan waktu yang
menjawabnya, berikan tenggat waktu bersedihlah secukupnya, rayakan
perasaanmu sebagai manusia”

(Baskara putra-Hindia)

HALAMAN PERSEMBAHAN

Karya skripsi ini merupakan wujud semangat, usaha, serta cinta dan kasih sayang yang berharga dalam perjalanan hidup penulis. Karya sederhana ini penulis persembahkan kepada:

1. Teristimewa untuk Bapak Sukardi, cinta pertama penulis. Terima kasih atas setiap tetes keringat, pengorbanan, dan kerja keras yang telah diberikan demi kehidupan dan pendidikan penulis. Meski tidak sempat merasakan bangku perkuliahan, Beliau mampu mengantarkan penulis hingga meraih gelar sarjana melalui didikan, motivasi, dan dukungan yang tiada henti. Semoga Beliau senantiasa diberikan kesehatan, umur yang panjang, dan kebahagiaan.
2. Untuk ibu siti chaerul ummah, ibuku tersayang, terimakasih atas segala doa, pesan harapan yang mendampingi setiap Langkah dan usaha penulis untuk menjadi seseorang yang berpendidikan. Terima kasih atas kasih sayang tanpa batas, kesabaran dan pengorbanan yang selalu mendampingi hidup penulis.
3. Terakhir kepada Wanita sederhana yang memiliki Impian besar, namun terkadang sulit dimengerti isi kepalanya, yaitu penulis diriku sendiri, zahrotul wathoniyah. Terimakasih sudah berjalan sejauh ini. Terima kasih kepada hati yang tetap ikhlas, meski tidak semua hal berjalan sesuai harapan. Terima kasih kepada jiwa yang tetap kuat, meski berkali-kali hampir menyerah. Terima kasih kepada raga yang terus melangkah, meski lelah sering kali tak terlihat. Penulis bangga kepada diri sendiri yang telah mampu melewati berbagai fase sulit dalam kehidupan ini. Mari terus bekerja sama untuk tumbuh dan berkembang, menjadi pribadi yang lebih baik dari hari ke hari.

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Mekanisme Radiolisis Pada Acrylic Acid *Interface* Akibat Radiasi Gamma Pada Drug Delivery System.” Shalawat serta salam semoga senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad SAW, beserta keluarga, sahabat, dan para pengikutnya hingga akhir zaman. Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

Penulis menyadari bahwa penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan, bimbingan, dan dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih yang sebesar-besar-nya kepada:

1. Kedua orang tua tercinta dan seluruh keluarga yang senantiasa memberikan doa, kasih sayang, dukungan, motivasi, serta pengorbanan yang tiada henti kepada penulis selama menempuh pendidikan hingga terselesaikannya skripsi ini.
2. Prof. Dr. Hj. Ilfi Nur Diana, M.Si., selaku Rektor Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang, atas dukungan dan kebijakan yang memperlancar proses akademik di lingkungan Universitas.
3. Dr. H. Agus Mulyono, S.Pd., M.Kes., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang, atas dukungan dan fasilitas akademik yang diberikan.

4. Farid Samsu Hananto, M.T., selaku Ketua Program Studi Fisika Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang, atas bimbingan administratif dan dukungan dalam penyusunan akademik.
5. Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si., Khusnul Yakin, M.Si., dan Dr. Umaiyyatus Syarifah, M.A., selaku dosen pembimbing, yang telah memberikan arahan, koreksi, ilmu, serta motivasi selama proses bimbingan hingga terselesaikannya skripsi ini.
6. Dr. H. Agus Mulyono, S.Pd., M.Kes. dan Ahmad Luthfin, M.Si., selaku dosen penguji yang telah memberikan saran, kritik, dan masukan yang membangun untuk penyempurnaan skripsi ini.
7. Seluruh dosen, staf Laboratorium dan staf administrasi UIN Maulana Malik Ibrahim Malang yang telah membantu menambah pengetahuan, memberikan akses fasilitas laboratorium, serta mendukung kelancaran administrasi penelitian.
8. Alivia, Anisa, dan Fafa, teman satu bimbingan yang telah menjadi teman seperjuangan selama proses penelitian dan penyusunan skripsi ini. Terima kasih atas dukungan, semangat, serta kehadirannya yang senantiasa membantu dan menemani penulis dalam melewati setiap tahap penelitian hingga skripsi ini dapat terselesaikan.
9. Adinda dan Ovin, yang senantiasa menemani dan menjadi pendengar yang baik bagi penulis selama menempuh pendidikan perkuliahan hingga selesainya skripsi ini. Terima kasih atas dukungan, perhatian, dan kebersamaan yang telah diberikan selama ini.

10. Najwa Nur Fitria, yang telah menjadi teman penulis sejak awal perkuliahan hingga akhir masa studi. Terima kasih atas kebersamaan, dukungan, semangat, serta berbagai pengalaman yang telah dilalui bersama selama menempuh pendidikan di bangku perkuliahan.
11. Teman-teman mahasiswa Program Studi Fisika angkatan 2022, yang telah memberikan semangat, dukungan moral, dan motivasi sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.
12. Serta semua pihak yang telah membantu baik secara langsung maupun tidak langsung dalam penyusunan dan penyelesaian skripsi ini; penulis mengucapkan terima kasih yang tulus.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu, kritik, saran, dan masukan yang bersifat membangun sangat penulis harapkan demi penyempurnaan penelitian ini di masa mendatang. Semoga penelitian ini dapat memberikan kontribusi bagi pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya dalam bidang interaksi radiasi dan aplikasi material polimer pada *Drug Delivery System*, serta bermanfaat bagi pembaca dan pihak-pihak yang berkepentingan.

Malang, 25 Juni 2026

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGANTAR	ii
HALAMAN PERSETUJUAN	iii
HALAMAN PENGESAHAN	iv
PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN	v
MOTTO	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN	vii
KATA PENGANTAR	viii
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR TABEL	xvi
ABSTRAK	xvii
ABSTRACT	xviii
مستخلص البحث	xix
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	5
1.3 Tujuan penelitian	5
1.4 Manfaat Penelitian	6
1.5 Batasan Masalah	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	8
2.1 Drug Delivery System (DDS)	8
2.2 Acrylic Acid (AA)	10
2.3 Radiasi Gamma pada Polymer DDS	12
2.4 Mekanisme Radiolisis pada Polimer akibat Radiasi Gamma	16
2.5 ORCA	18
2.6 <i>Density Functional Teori</i> (DFT)	19
2.6.1 Persamaan Schrodinger Banyak Partikel	20
2.6.2 Pendekatan Born-Oppenheimer	21
2.6.3 Aproksimasi Hartree-Fock	21
2.6.4 Teorema Hohenberg-Kohn	22
2.6.5 Pendekatan Kohn-Sham	23
2.7 AIMD	25
2.7.1 Born–Oppenheimer Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD)	27
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	29
3.1 Jenis Penelitian	29
3.2 Waktu dan Tempat Penelitian	29
3.3 Alat dan Bahan	29
3.3.1 Perangkat Keras	29
3.3.2 Perangkat Lunak	30
3.3.3 Variabel Penelitian	30
3.3.4 Diagram Alir Penelitian	32
3.3.5 Diagram Alir Perhitungan	33

3.4	Prosedur Penelitian	34
3.4.1	Pembuatan Model Geometri Acrylic Acid <i>interface</i>	34
3.4.2	Optimasi Geometri pada Acrylic Acid <i>interface</i>	34
3.4.3	Perubahan Elektron Density	35
3.5	Pengambilan Data	36
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	39
4.1	Hasil Penelitian.....	39
4.1.1	Model Geometri Acrylic Acid <i>Interface</i>	39
4.1.2	Distribusi Kerapatan Elektron pada acrylic acid <i>Interface</i>	42
4.1.3	Mekanisme Radiolisis Gugus Karboksil pada Acrylic Acid <i>Interface</i>	47
4.2	Pembahasan	58
4.2.1	Struktur Geometri Acrylic Acid <i>Interface</i>	58
4.2.2	Distribusi Kerapatan Elektron pada acrylic acid <i>Interface</i>	60
4.2.3	Mekanisme Radiolisis Gugus Karboksil pada Acrylic Acid <i>Interface</i>	63
4.2.4	Perbandingan dengan Penelitian Sebelumnya	68
4.2.5	Kajian Keislaman.....	70
BAB V	PENUTUP.....	74
5.1	Kesimpulan	74
5.2	Saran	75
DAFTAR PUSTAKA.....		76
LAMPIRAN.....		81

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Mekanisme efek radiasi gamma (Campbell et al, 1989)	15
Gambar 2.2	Reaksi utama yang terjadi pada radiolisis (Khakim, 2019).....	18
Gambar 2.3	Skema perhitungan Density Functional Theory (DFT).....	25
Gambar 3.1	Diagram alir peneltian	32
Gambar 3.2	Diagram alir perhitungan.....	33
Gambar 4.1	Hasil struktur optiimasi geometri (a) monomer Acrylic Acid, (b) dimer Acrylic Acid interface, dan (c) trimer Acrylic Acid interface yang diperoleh berdasarkan perhitungan Density Functional Theory (DFT) menggunakan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-31++G**, serta koreksi dispersi DFT-D4	40
Gambar 4.2	Perubahan distribusi kerapatan elektron pada monomer Acrylic Acid akibat ionisasi pada keadaan netral, +1 dan +2, warna kuning (pengurangan kerapatan elektron), warna biru (peningkatan kerapatan elektron). Perhitungan dilakukan menggunakan metode Density functional teory (DFT) dengan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-311++G**, dan koreksi dispersi DFT-D4	43
Gambar 4.3	Perubahan distribusi kerapatan elektron pada dimer Acrylic Acid interface akibat ionisasi pada keadaan netral, +1, +2, dan +4, di mana warna kuning menunjukkan pengurangan kerapatan elektron dan warna biru menunjukkan peningkatan kerapatan elektron. Perhitungan dilakukan menggunakan metode Density Functional Teori (DFT) dengan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-311++G**, dan Koreksi dispersi DFT-D4.....	44
Gambar 4.4	Perubahan distribusi kerapatan elektron pada trimer Acrylic Acid interface akibat ionisasi pada keadaan netral, +1, +2, dan +6, di mana warna kuning menunjukkan pengurangan kerapatan elektron dan warna biru menunjukkan peningkatan kerapatan elektron. Perhitungan dilakukan menggunakn metode DFT dengan Fungsional CAM-B3LYP, Basis set 6-311++G**, dan koreksi dispersi DFT-D4.	45
Gambar 4.5	(a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada monomer Acrylic Acid dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.0 (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +2 pada waktu 39,5 fs.....	48
Gambar 4.6	Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada monomer Acrylic Acid dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.	49

- Gambar 4.7 (a) Grafik Perubahan panjang ikatan C-C pada dimer Acrylic Acid Interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +2 pada waktu 34 fs. 50
- Gambar 4.8 Grafik Perubahan panjang ikatan C-C pada dimer Acrylic Acid interface dalam keadaan terionisasi +4, di mana warna hitam menunjukkan ikatan C2-C4 dan warna merah menunjukkan ikatan C5-C6. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +4 pada waktu 63,5 fs. 51
- Gambar 4.9 Grafik perubahan panjang ikatan O-H pada dimer Acrylic Acid interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan O-H pada ionisasi +2 pada waktu 187,5 fs. 52
- Gambar 4.10 Grafik perubahan panjang ikatan C-C pada trimer Acrylic Acid interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +1 pada waktu 111 fs dan pada ionisasi +2 pada waktu 37 fs. Menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. 54
- Gambar 4.11 Grafik Perubahan panjang ikatan C-C pada trimer Acrylic Acid dalam keadaan terionisasi +6, di mana warna hitam menunjukkan ikatan C2-C4, warna biru menunjukkan ikatan C9-C10 dan warna merah menunjukkan ikatan C5-C6. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +6 pada waktu 50,5 fs. 55
- Gambar 4.12 Grafik perubahan panjang ikatan O-H pada trimer Acrylic Acid interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi

+2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan O-H pada ionisasi +1 pada waktu 115 fs dan pada ionisasi +2 pada waktu 135 fs.56

Gambar 4. 13 Grafik Perubahan panjang ikatan O-H pada trimer Acrylic Acid dalam keadaan terionisasi +6, di mana warna hitam menunjukkan ikatan O2-H1, warna biru menunjukkan ikatan O3-H9 dan warna merah menunjukkan ikatan O6-H17. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.....57

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1	Klasifikasi perangkat keras penelitian.....	30
Tabel 3. 2	Perangkat Lunak Penelitian.....	30
Tabel 3. 3	Hasil gambar perhitungan geometri	36
Tabel 3. 4	Perubahan elektron density pada monomer acrylic acid.....	37
Tabel 3. 5	Perubahan elektron density pada dimer acrylic acid.....	37
Tabel 3. 6	Perubahan elektron density pada trimer acrylic acid	37
Tabel 3. 7	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada monomer acrylic acid dalam keadaan netral dan bermuatan.....	38
Tabel 3. 8	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada dimer acrylic acid interface dalam keadaan netral dan bermuatan.....	38
Tabel 3. 9	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada trimer acrylic acid interface dalam keadaan netral dan bermuatan.....	38
Tabel 4. 1	Panjang ikatan C–C dan O–H hasil optimasi geometri DFT pada monomer, dimer, dan trimer Acrylic Acid interface.....	41
Tabel 4. 2	Waktu disosiasi ikatan (dalam fs) pada ikatan C–C dan O–H monomer Acrylic Acid dalam keadaan netral dan bermuatan.....	49
Tabel 4. 3	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada Dimer Acrylic Acid Interface dalam keadaan netral dan bermuatan.	52
Tabel 4. 4	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada trimer Acrylic Acid interface dalam keadaan netral dan bermuatan.....	57

ABSTRAK

Wathoniyah, Zahrotul. 2026. **Mekanisme Radiolisis pada Acrylic Acid *Interface* Akibat Radiasi Gamma pada *Drug Delivery System***. Skripsi. Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

Pembimbing: (I) Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si. (II) Dr. Umaiatus Syarifah, M.A

Kata kunci: Radiolisis, Acrylic Acid Interface, Radiasi Gamma, AIMD, Drug Delivery System

Acrylic acid AA merupakan material penyusun yang banyak digunakan sebagai pembawa (*carrier*) dalam *Drug Delivery System* (DDS) karena memiliki gugus karboksil ($-\text{COOH}$) yang bersifat bioadhesif dan responsif terhadap pH. Paparan radiasi gamma berpotensi menyebabkan radiolisis yang mengubah struktur dan sifat fungsional material, namun kajian atomistik mengenai mekanisme radiolisis pada skala *interface* masih terbatas. Penelitian ini bertujuan menganalisis struktur geometri paling stabil, perubahan kerapatan elektron, serta mekanisme radiolisis gugus karboksil pada monomer, dimer, dan trimer acrylic acid *interface* akibat ionisasi. Analisis dilakukan menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.0. Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa panjang ikatan C–C berada pada kisaran 1,50–1,51 Å, sedangkan ikatan O–H pada dimer dan trimer mengalami pemanjangan dibandingkan monomer akibat terbentuknya interaksi ikatan hidrogen antargugus karboksil pada daerah *interface*. Analisis distribusi kerapatan elektron menunjukkan bahwa gugus karboksil merupakan bagian yang paling awal mengalami redistribusi elektron, dengan penyebaran gangguan yang semakin luas seiring meningkatnya tingkat ionisasi dan jumlah rantai polimer. Simulasi AIMD menunjukkan bahwa ikatan C–C lebih rentan mengalami pemutusan dibandingkan ikatan O–H, pemutusan ikatan terjadi pada ionisasi +2 untuk monomer dan dimer, sedangkan pada trimer telah terjadi sejak ionisasi +1, yang menunjukkan bahwa peningkatan kompleksitas struktur meningkatkan kerentanan terhadap ionisasi. Hasil penelitian ini memberikan pemahaman atomistik mengenai mekanisme radiolisis pada acrylic acid *interface* yang dapat menjadi landasan ilmiah dalam pengembangan DDS berbasis AA yang lebih stabil dan efektif terhadap paparan radiasi gamma.

ABSTRACT

Wathoniyah, Zahrotul. 2026. **Radiolysis Mechanism of Acrylic Acid *Interface* Induced by Gamma Radiation in Drug Delivery System**. Undergraduate Thesis. Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Maulana Malik Ibrahim State Islamic University, Malang.

Supervisor: (I) Prof. Dr. Drs. Mokhamad Tirono, M.Si. (II) Dr. Umaiyyatus Syarifah, M.A

Keywords: Radiolysis, Acrylic Acid Interface, Gamma Radiation, AIMD, Drug Delivery System

Acrylic acid (AA) is a widely used constituent material as a carrier in Drug Delivery Systems (DDS) because it possesses carboxyl groups ($-\text{COOH}$) that are bioadhesive and pH-responsive. Exposure to gamma radiation has the potential to cause radiolysis, which alters the structure and functional properties of the material; however, atomistic studies on the mechanism of radiolysis at the interface scale remain limited. This study aims to analyze the most stable geometric structure, changes in electron density, and the mechanism of carboxyl group radiolysis at the acrylic acid interface in monomers, dimers, and trimers resulting from ionization. The analysis was performed using the Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) method combined with Density Functional Theory (DFT) at the CAM-B3LYP/6-311++G** level via ORCA 6.0.0 software. The results of the geometric optimization show that the C–C bond length is in the range of 1.50–1.51 Å, while the O–H bonds in the dimers and trimers are elongated compared to the monomers due to the formation of hydrogen bonding interactions between carboxyl groups in the interface region. Electron density analysis shows that the carboxyl group is the first to undergo electron redistribution, with the disturbance spreading more widely as the degree of ionization and the number of polymer chains increase. AIMD simulations show that C–C bonds are more susceptible to breaking than O–H bonds; bond breaking occurs at +2 ionization for monomers and dimers, whereas for trimers it occurs as early as +1 ionization, indicating that increased structural complexity enhances susceptibility to ionization. The results of this study provide an atomistic understanding of the radiolysis mechanism at the acrylic acid interface, which can serve as a scientific foundation for the development of AA-based DDS that is more stable and effective against gamma radiation exposure.

مستخلص البحث

وطانية، زهرة. 2026. آلية التحلل الإشعاعي عند واجهة حمض الأكريليك نتيجة الإشعاع غاما في نظام توصيل الدواء. بحث جامعي. قسم الفيزياء، كلية العلوم والتكنولوجيا، جامعة مولانا مالك إبراهيم الإسلامية الحكومية مالانج. المشرفون: (الأول) الأستاذ الدكتور محمد تيرونو، الماجستير (الثاني) الدكتورة أمية الشريفة، الماجستير

الكلمة الرئيسية: التحلل الإشعاعي، واجهة حمض الأكريليك، إشعاع غاما، المحاكاة الجزيئية الديناميكية الكمية، نظام توصيل الدواء

حمض الأكريليك AA هو مادة رئيسية تُستخدم كثيرًا كحامل في نظام توصيل الدواء (DDS) لأنه يحتوي على مجموعة الكربوكسيل ($-COOH$) التي تتميز بالالتصاق الحيوي والاستجابة لتغير الرقم الهيدروجيني. التعرض للإشعاع الغاما قد يؤدي إلى التحلل الإشعاعي الذي يغير من البنية والخصائص الوظيفية للمادة، ومع ذلك الدراسات الذرية حول آلية التحلل الإشعاعي على مستوى الواجهة ما زالت محدودة. تهدف هذه الدراسة إلى تحليل أكثر البنى الهندسية استقرارًا، وتغير كثافة الإلكترونات، وكذلك آلية التحلل الإشعاعي لمجموعة الكربوكسيل في الأحادي والثلاثي لحمض الأكريليك على الواجهة نتيجة التأين. تم إجراء التحليل باستخدام طريقة الديناميكا الجزيئية من المنطلق الأول (AIMD) بالاشتراك مع نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) على مستوى CAM-B3LYP/311-6 G**++ باستخدام برنامج 0.0.6ORCA. أظهرت نتائج تحسين الهندسة أن طول رابطة C-C يتراوح بين 1.50-1.51 Å، بينما ترتفع روابط O-H في الديمر والترايمر مقارنة بالمونومر بسبب تكون تفاعلات الروابط الهيدروجينية بين مجموعات الكربوكسيل عند المنطقة الفاصلة. ويشير تحليل توزيع كثافة الإلكترون إلى أن مجموعة الكربوكسيل هي الجزء الذي يمر بإعادة توزيع الإلكترونات أولاً، مع انتشار التشويش بشكل أوسع كلما زادت مستويات التأين وعدد سلاسل البوليمر. وتوضح محاكاة AIMD أن الروابط C-C أكثر عرضة للانكسار مقارنة بروابط O-H؛ حيث يحدث كسر الروابط عند التأين $2+$ للمونومر والديمر، بينما يظهر في الترايمر منذ التأين $1+$ ، ما يشير إلى أن زيادة تعقيد البنية تزيد من القابلية للتأين. تقدم نتائج هذا البحث فهماً ذرياً حول آلية التحلل الإشعاعي عند واجهة حمض الأكريليك، والذي يمكن أن يكون أساساً علمياً لتطوير نظم توصيل الدواء القائمة على حمض الأكريليك وأكثر استقراراً وفعالية ضد التعرض للإشعاع غاما.

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Drug Delivery System (DDS) adalah sistem atau formulasi yang membantu menghantarkan obat ke dalam tubuh secara lebih efektif dengan mengendalikan laju, waktu, dan tempat pelepasannya, sehingga meningkatkan kemanjuran dan keamanan. Selain itu, DDS juga berfungsi untuk mengatasi hambatan penghantaran obat, termasuk modifikasi senyawa aktif menjadi *prodrug* yang lebih mudah ditransportasikan (Barkah et al., 2023). Dalam sistem penghantaran obat, partikel matrik yang berperan sebagai pembawa (*carrier*) diusahakan berukuran nano, dengan proses pembuatan sistem dilakukan melalui cara melarutkan, mengenkapsulasi, atau menempelkan obat di dalam matrik (Yopianto et al., 2016).

Metode pemberian obat secara konvensional masih menghadapi berbagai keterbatasan, seperti degradasi obat sebelum mencapai target, distribusi yang tidak spesifik, serta munculnya efek samping sistemik akibat paparan pada jaringan sehat (Pacheco et al., 2023). Permasalahan ini menjadi tantangan besar terutama pada terapi penyakit kronis dan kanker yang memerlukan dosis tinggi serta ketepatan sasaran. Oleh karena itu, pengembangan Drug Delivery System (DDS) menjadi sangat penting sebagai solusi untuk meningkatkan efisiensi penghantaran obat, menekan toksisitas, serta memastikan obat bekerja secara optimal pada lokasi yang dituju (W. Chen et al., 2024).

Sejumlah material telah banyak diteliti sebagai matriks DDS. Polimer alami seperti kitosan, kitin, dan selulosa digunakan karena memiliki gugus aktif ($-OH$,

–NH₂) yang mampu berinteraksi dengan molekul obat melalui ikatan hidrogen maupun interaksi elektrostatik (Yopianto et al., 2016) . Selain itu, polimer sintesis juga banyak dikembangkan untuk meningkatkan kestabilan, fleksibilitas, serta efektivitas pelepasan obat, di antaranya poli (etilen glikol) (PEG), poli (vinil alkohol) (PVA), dan Poly (acrylic acid) (PAA) (Martien et al., 2012).

Acrylic Acid (AA) adalah polimer vinil dengan rumus kimia $(C_3H_4O_2)_n$, merupakan polimer vinil yang menunjukkan sifat bio-adhesif dan terdiri atas gugus karboksil (–COOH) yang memungkinkannya menjebak molekul lain melalui ikatan hidrogen maupun cross-linking. Sifat-sifat ini menjadikan material ini penting dalam aplikasi medis, khususnya sebagai material pembawa dalam DDS (Ito et al., 2022). Selain itu, AA bersifat pH-responsive, karena gugus –COOH dapat terionisasi pada kondisi tertentu, sehingga struktur dan muatan polimer dapat berubah mengikuti lingkungan biologis (Kausar, 2020). Pada skala antarmuka (*interface*), AA menunjukkan mobilitas dan orientasi rantai yang khas, yang berpengaruh penting terhadap kemampuan penempelan, stabilitas, serta interaksi awal dengan obat maupun medium biologis. Hal ini menjadikan AA salah satu material yang sangat potensial untuk digunakan sebagai matriks DDS modern (Smith et al., 2018).

Dalam ajaran Islam, diyakini bahwa ilmu pengetahuan diberikan sebagai sarana untuk kemaslahatan manusia, termasuk dalam upaya menjaga kesehatan dan menyembuhkan penyakit, termasuk dalam pengembangan teknologi medis seperti *Drug Delivery System* (DDS). Sebagaimana Allah berfirman dalam QS. ash-Shu'ara (26):80:

وَإِذَا مَرَضْتُ فَهُوَ يَشْفِينِ

Artinya: *“Dan apabila aku sakit, Dialah yang menyembuhkan aku”*

QS. Ash-Shu'ara (26):80 menjelaskan bahwa Allah adalah penyembuh setiap penyakit, namun manusia diperintahkan untuk berikhtiar mencari pengobatan. Tafsir Ibnu Katsir menegaskan bahwa usaha manusia melalui ilmu pengetahuan dan obat-obatan merupakan sarana yang diperkenankan Allah untuk memperoleh kesembuhan, sementara hasil akhirnya tetap berada di tangan-Nya (Katsir, 1923). Penafsiran ini diperkuat oleh M. Quraish Shihab yang menegaskan bahwa ayat tersebut mengajarkan sikap seorang mukmin, yaitu berikhtiar secara maksimal melalui ilmu pengetahuan dan pengobatan, sembari menyerahkan hasil akhirnya kepada Allah sebagai *al-Syāfi* Zat Yang Maha Menyembuhkan (Shihab, 2002). Hal ini diperkuat oleh sebuah hadist yang diriwayatkan oleh Ibnu Mas'ud, bahwa Rasulullah SAW bersabda:

إِنَّ اللَّهَ لَمْ يَنْزِلْ دَاءً إِلَّا أَنْزَلَ لَهُ شِفَاءً، عِلْمُهُ مَنْ عِلْمُهُ وَجَهْلُهُ مَنْ جَهْلُهُ

Artinya: *“Sesungguhnya Allah tidaklah menurunkan sebuah penyakit melainkan menurunkan pula obatnya. Obat itu diketahui oleh orang yang bisa mengetahuinya dan tidak diketahui oleh orang yang tidak bisa mengetahuinya”*

Hadits yang diriwayatkan oleh Ibnu Mas'ud dan QS. Ash-Shu'ara (26):80 menegaskan bahwa setiap penyakit memiliki potensi untuk disembuhkan, namun penemuan obat memerlukan upaya dan kemampuan manusia. Dalam konteks penelitian ini, hal tersebut mendorong pentingnya pemahaman mekanisme radiolisis pada Acrylic Acid *interface* agar DDS yang dirancang dapat lebih aman, stabil, dan efektif. Sehingga, potensi obat dapat dimanfaatkan secara optimal dalam pengobatan.

Acrylic Acid diaplikasikan dalam DDS melalui pembentukan cross-linking yang diperoleh melalui penyinaran radiasi gamma. Radiasi gamma berenergi tinggi dapat berinteraksi langsung dengan atom-atom penyusun AA melalui

mekanisme efek Compton, interaksi dapat memicu terjadinya radiolisis, yaitu pemecahan ikatan molekul akibat radiasi pengion, seperti sinar gamma atau elektron berenergi tinggi yang menghasilkan spesies reaktif seperti radikal bebas, ion, dan molekul tereksitasi (Bothe & Hildenbrand, 1995). Penelitian terdahulu yang dilakukan oleh Hill et al pada tahun 1992 menunjukkan bahwa radiolisis gamma pada acrylic acid (AA) menghasilkan produk utama berupa karbon dioksida (CO_2) dan karbon monoksida (CO). Pembentukan CO_2 terutama berkaitan dengan proses pelepasan gugus karboksil ($-\text{COOH}$) yang merupakan gugus fungsional utama pada struktur PAA. Nilai G-value, yaitu jumlah molekul produk yang terbentuk per satuan energi radiasi yang diserap, menunjukkan bahwa G-value pembentukan CO_2 lebih besar dibandingkan dengan CO. Hal ini mengindikasikan bahwa proses dekarboksilasi akibat paparan radiasi gamma lebih dominan menghasilkan CO_2 .

Selain itu, rasio $\text{CO}:\text{CO}_2$ pada AA tercatat lebih tinggi dibandingkan dengan material-material yang lain (Hill et al., 1992). Hal ini menegaskan bahwa gugus karboksil pada polimer ini sangat rentan terhadap kerusakan akibat radiasi. Akan tetapi, penelitian eksperimental pada skala mikroskopik masih sulit dilakukan, terutama untuk mengamati dinamika AA *interface* yang berperan penting dalam interaksi dengan obat maupun medium biologis. Oleh karena itu, diperlukan kajian lebih lanjut untuk memahami bagaimana mekanisme radiolisis terjadi pada AA *interface* akibat radiasi gamma, sehingga dapat diperoleh gambaran yang lebih jelas mengenai perubahan sifat fungsional material ini.

Pendekatan pemodelan komputasi menjadi salah satu alternatif yang tepat untuk memahami mekanisme radiolisis pada acrylic acid (AA) *interface*. Analisis

dilakukan menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) untuk menggambarkan secara mendetail perubahan struktur geometri dan sifat elektronik acrylic acid (AA) *interface* setelah proses ionisasi akibat radiasi gamma. Dengan pendekatan komputasi ini, diharapkan diperoleh pemahaman yang komprehensif mengenai mekanisme radiolisis pada AA *interface*, yang selanjutnya dapat menjadi landasan ilmiah dalam pengembangan *drug delivery system* (DDS) berbasis AA yang lebih stabil dan efektif.

1.2 Rumusan Masalah

Adapun rumusan masalah dalam penelitian ini, Adalah:

1. Bagaimana model geometri pada monomer, dimer dan trimer acrylic acid (AA) *interface* pada energi yang paling stabil?
2. Bagaimana pola distribusi elektron pada gugus karboksil AA *interface* pada berbagai tingkat ionisasi?
3. Bagaimana proses atau mekanisme radiolisis gugus karboksil yang terjadi pada acrylic acid *Interface*?

1.3 Tujuan penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini, Adalah:

1. Menganalisis model geometri yang paling stabil pada monomer, dimer, dan trimer acrylic acid AA *interface*.
2. Menganalisis pola distribusi elektron pada gugus karboksil acrylic acid (AA) *interface* pada berbagai tingkat ionisasi.
3. Mengidentifikasi proses dan mekanisme radiolisis gugus karboksil yang terjadi pada acrylic acid *interface*.

1.4 Manfaat Penelitian

1. Manfaat Teoritis

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan pemahaman mengenai mekanisme radiolisis pada acrylic acid akibat radiasi gamma, terutama pada area *interface* yang memengaruhi kestabilan dan sifat fungsional material.

2. Manfaat praktis

Penelitian ini diharapkan dapat menjadi dasar pengembangan *Drug Delivery System* (DDS) berbasis acrylic acid *interface* yang lebih stabil dan efektif terhadap paparan radiasi gamma.

1.5 Batasan Masalah

Adapun Batasan masalah yang digunakan dalam penelitian ini, Adalah:

1. Penelitian ini difokuskan pada material acrylic acid dengan rumus kimia $(C_3H_4O_1)_n$ yang digunakan sebagai material pembawa (*carrier*) dalam *Drug Delivery System* (DDS).
2. Jenis radiasi yang digunakan terbatas pada radiasi gamma berenergi tinggi.
3. Ruang lingkup kajian difokuskan pada acrylic acid *interface*, yaitu permukaan yang berperan penting dalam proses interaksi antara material pembawa, molekul obat, dan medium biologis.
4. Analisis gugus fungsional dibatasi pada gugus karboksil ($-COOH$), khususnya pada ikatan O-H dan C-C yang memiliki kerentanan tinggi terhadap proses radiolisis.

5. Metode analisis menggunakan *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) untuk menganalisis perubahan struktur dan sifat elektronik.
6. Parameter yang diamati meliputi probabilitas jumlah ionisasi, distribusi kerapatan elektron pada ikatan spesifik, dan mekanisme radiolisis yang terjadi.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Drug Delivery System (DDS)

Drug Delivery System (DDS) adalah sistem pembawa obat yang terdiri dari matrik pembawa dan obat yang dibawa. Sistem ini dapat mengatur pelepasan obat secara terkontrol ke tujuan yang ditargetkan (sel target) dan melindungi obat dari lingkungan yang dapat mendegradasinya. Untuk meningkatkan jumlah zat dalam *Drug Delivery System* dapat dilakukan dengan proses melarutkan, mengenkapsulasi atau dengan menambahkan zat crosslink. DDS dapat menggunakan berbagai material sebagai matrik seperti polimer alam atau sintetik, lipid, dan surfaktan, yang dapat langsung menghantarkan obat ke target secara spesifik. DDS adalah upaya untuk mengatasi masalah penghantaran dengan mengubah molekul obat menjadi prodrug yang lebih mudah ditransportkan (*transportable*). Dalam sistem penghantaran obat, partikel matrik yang berperan sebagai pembawa (*carrier*) diusahakan berukuran nano. (Yopianto et al., 2016).

Prinsip kerja *Drug delivery system* (DDS) meliputi mekanisme seperti difusi, reaksi kimia, reaksi pelarut, dan kontrol stimulus (misalnya, pH, suhu, ultrasound, atau medan magnetik). Dalam konteks ini, polimer seperti (acrylic acid) (AA) dapat digunakan sebagai matriks hidrogel responsif pH karena gugus karboksilatnya yang terprotonasi atau deprotonasi sesuai pH lingkungan. PAA dapat dikombinasikan dengan Polyethylene Glycol (PEG), polisakarida atau dibuat menjadi kopolimer untuk memodulasi degradasi, bioadhesi, dan laju pelepasan obat (Ezike et al., 2023).

Kemajuan yang signifikan telah dicapai dalam beberapa tahun terakhir

dalam pengembangan *Drug Delivery System* (DDS) berbasis nanopartikel organik, anorganik, dan hibrida sebagai pembawa obat untuk penargetan aktif, terutama pada terapi kemoterapi. Pada kemoterapi konvensional, obat diberikan secara sistemik melalui injeksi atau oral dan kemudian menyebar ke seluruh tubuh melalui aliran darah tanpa mekanisme pengontrolan khusus. Akibatnya, distribusi obat tidak selektif sehingga selain menyerang sel kanker, obat juga merusak sel sehat dan menimbulkan efek samping sistemik. Selain itu, sebagian obat dapat terdegradasi atau terdistribusi ke organ lain sebelum mencapai jaringan tumor, sehingga efektivitas terapi menjadi tidak optimal dan dosis sering kali harus ditingkatkan, yang justru meningkatkan toksisitas. Untuk mengatasi keterbatasan tersebut, dikembangkan DDS yang mampu menghantarkan obat secara lebih terarah dan melepaskannya secara terkontrol (Sofia Rahmi, n.d. 2025).

DDS diformulasikan dengan berbagai sifat yang telah ditingkatkan, seperti ukuran partikel yang lebih kecil, permeabilitas dan kelarutan yang lebih tinggi, efektivitas terapeutik yang lebih baik, kemampuan penargetan situs spesifik, serta peningkatan stabilitas dan penurunan toksisitas. Sistem ini mampu memberikan pelepasan obat secara berkelanjutan dan meningkatkan kinerja agen terapeutik dibandingkan bentuk sediaan konvensional (Yun et al., 2015).

DDS juga merupakan kemajuan teknologi yang menjanjikan dengan aplikasi luas, karena dirancang untuk melepaskan obat secara terkontrol pada laju tertentu dan di lokasi yang dituju secara spesifik. Berbagai pendekatan modern, seperti nanopartikel, *molecularly imprinted polymers*, serta teknologi pencetakan 3D (3D printing), telah muncul sebagai inovasi mutakhir dalam bidang farmasi. Melalui pendekatan multidisipliner, DDS dikembangkan untuk memodulasi

metabolisme, potensi, toksisitas, imunogenisitas, serta biorecognition obat, sehingga mampu meningkatkan lingkungan kerja obat di dalam tubuh dan memfasilitasi penyerapannya dengan lebih efisien (Q. Chen et al., 2024).

Dibandingkan formulasi konvensional, DDS menawarkan sejumlah keunggulan, di antaranya:

1. meningkatkan stabilitas obat dan mencegah degradasi
2. mengoptimalkan distribusi obat dengan meningkatkan konsentrasi di lokasi target serta mengurangi efek samping
3. memungkinkan pelokalan dan pelepasan obat yang presisi, termasuk kemampuan menembus blood–brain barrier
4. menurunkan dosis terapeutik yang dibutuhkan, mengurangi toksisitas, dan meningkatkan indeks terapeutik (Yang et al., 2025).

Secara keseluruhan, pengembangan DDS modern diarahkan untuk meningkatkan efektivitas terapi sekaligus menurunkan toksisitas, dengan inovasi teknologi yang terus disempurnakan untuk mencapai sistem penghantaran obat yang lebih aman, efisien, dan berkelanjutan.

2.2 Acrylic Acid (AA)

Acrylic Acid (AA) atau yang sering dikenal sebagai karbomer, adalah polimer asam akrilat (AA) dengan gugus karboksilat ($-\text{COOH}$) pada setiap ujung unit monomernya terhubung ke gugus vinil. Karena banyaknya gugus karboksil, AA yang merupakan polimer hidrofilik memiliki biokompatibilitas yang baik dan dengan demikian dapat digunakan sebagai modifikasi permukaan untuk nanomaterial biomedis (Arkaban et al., 2022).

AA adalah polimer yang larut dalam air dengan berat molekul tinggi. Seingga, dapat membentuk lapisan film transparan dan rapuh. AA juga merupakan polimer hidroskopis yang mampu menarik dan menahan molekul air melalui penyerapan atau adsorpsi dari lingkungan (Arkaban et al., 2022). AA murni memiliki suhu transisi gelas (*glass transition temperature*) di atas 100°C. Dalam air, AA berperilaku sebagai polimer anionik karena kehilangan proton dari gugus karboksilnya.

AA dapat mengalami cross-linking melalui beberapa cara, antara lain melalui radiasi, alil eter dari hidrokarbon, atau senyawa kimia lainnya. AA juga dapat mengalami cross-linking pada temperatur di atas 200°C. Pada suhu tinggi, AA dapat kehilangan air dan membentuk jaringan (*network*) yang tidak larut dan saling terhubung (*cross-linking*). AA yang telah mengalami cross-linking dapat membentuk struktur menyerupai gel. Sebagai contoh, cross-linking kimia dapat dilihat pada kasus AA-graft kitosan, di mana monomer asam akrilat dan kitosan dilarutkan dan dipolimerisasi dengan adanya agen cross-linking seperti N, N'-methylenebisacrylamide pada suhu 70°C. AA yang telah mengalami cross-linking mampu menyerap dan menahan air hingga lebih dari 100 kali berat aslinya.

AA merupakan polimer yang biodegradable dan ramah lingkungan, memiliki kekuatan mekanik yang tinggi dan transparansi yang baik. Karena banyaknya gugus karboksil, PAA memiliki biokompatibilitas yang baik sehingga dapat digunakan sebagai modifikasi permukaan untuk nanomaterial biomedis. Oleh karena itu, AA telah banyak digunakan dalam berbagai aplikasi seperti perekat (*adhesives*), pelapis (*coatings*), keperluan rumah tangga, kemasan

(*packaging*), farmasi, *drug delivery system*, dan berbagai bidang biomedis lainnya (Kausar, 2021).

Dalam aplikasi *Drug Delivery System* (DDS), pemahaman tentang sifat dan perilaku Acrylic Acid *interface* menjadi sangat penting karena berfungsi sebagai zona kontak utama dengan molekul obat dan medium biologis. Acrylic Acid *interface* didefinisikan sebagai lapisan permukaan atau antarmuka dengan ketebalan beberapa nanometer yang menjadi titik interaksi langsung antara rantai polimer Acrylic Acid dengan molekul. *Interface* ini memiliki karakteristik berbeda dari material bulk karena rantai polimer di *interface* memiliki mobilitas lebih tinggi, kerapatan yang lebih rendah, dan orientasi molekular yang berbeda dibandingkan dengan bagian dalam material (Smith et al., 2018).

Sifat bio-adhesif Acrylic Acid (AA) yang berasal dari gugus karboksil (–COOH) menjadi lebih dominan di *interface*, memungkinkan ikatan hidrogen yang kuat dengan molekul obat, sehingga meningkatkan efisiensi enkapsulasi dan pelepasan terkendali (Johnson & Lee, 2020). Namun, *interface* ini juga rentan terhadap perubahan struktural akibat radiasi gamma, di mana proses radiolisis dapat mengubah orientasi rantai polimer dan mengurangi bio-adhesi, yang berpotensi mempengaruhi stabilitas DDS secara (Hill et al., 1992; Ito et al., 2022). Oleh karena itu, studi tentang dinamika AA *interface* melalui simulasi komputasi diperlukan untuk mengoptimalkan desain *carrier* berbasis AA yang tahan terhadap degradasi radiasi.

2.3 Radiasi Gamma pada Polymer DDS

Sinar gamma merupakan gelombang elektromagnetik yang memiliki frekuensi tertinggi. Sinar gamma dihasilkan oleh inti-inti atom yang tidak stabil

(zat radioaktif). Sinar gamma memiliki daya tembus yang sangat besar hingga dapat menembus plat timbal dengan ketebalan beberapa cm. Sumber yang dapat memancarkan sinar gamma salah satunya radioisotop Cobalt-60. Cobalt-60 dapat memancarkan sinar gamma dengan energi 1.33 MV (Bashori et al., 2016).

Interaksi Radiasi dengan materi dapat menimbulkan beberapa kejadian, diantaranya (Gumilar et al., 2016):

1. Efek fotolistrik

Proses efek fotolistrik pada radiasi gamma berupa foton berinteraksi dengan orbit elektron dari atom, yang berakibat elektron tersebut terpelanting keluar. Akibat keluarnya elektron dari orbit, maka akan diisi oleh elektron dari orbit lain dengan memancarkan energi yang berupa sinar-X. proses terjadinya efek fotolistrik pada energi sinar gamma rendah kurang dari 60 keV.

2. Hamburan compton

Proses efek hamburan compton berupa energi radiasi yang diberikan ke elektron (foto elektron) untuk ionisasi menumbuk elektron bebas atau elektron yang ikatannya dengan inti lemah dan sisanya berupa gelombang elektromagnetik yang dihamburkan. Proses terjadinya efek hamburan compton pada energi sinar gamma sekitar sama dengan dengan 60 KeV.

3. Produksi pasangan elektron

Reaksi produksi pasangan terjadi bila energi yang menembus bahan diatas 1.022 MeV. Karena energi foton yang menembus bahan ini sangat tinggi, maka timbul pasangan elektron dan energi kinetik. Semua foton energi ini berhasil "masuk" sampai ke daerah medan inti bahan materi.

Foton tersebut akan diserap habis dan akan dipancarkan pasangan elektron-positron. Elektron yang terbentuk dari interaksi sinar gamma disebut elektron sekunder yang dibekali energi, sehingga menjadi sangat reaktif. Elektron sekunder ini akan mengionisasi materi yang dilaluinya (Sahara, 2023).

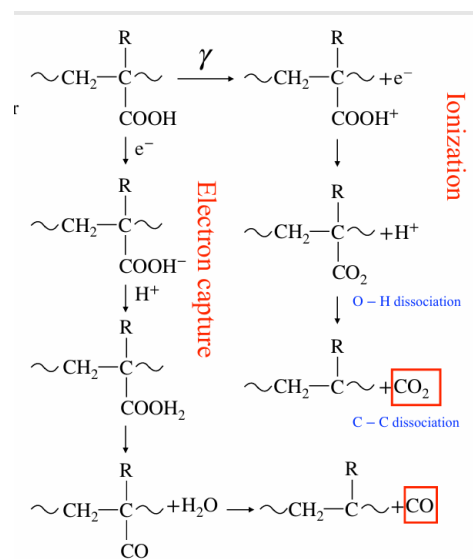
Air juga tidak luput dari interaksi dengan radiasi. Air akan menyerap energi radiasi sehingga terjadi eksitasi yaitu berpindahnya elektron dari tingkat energi yang lebih rendah ke tingkat energi yang lebih tinggi. Proses ini juga dapat menimbulkan ionisasi dimana pada bahan yang terkena radiasi akan terjadi perubahan atom atau molekul menjadi ion karena mengalami penambahan atau pengurangan partikel bermuatan seperti elektron atau lainnya (Bashori et al., 2016).

Fenomena serupa juga terjadi pada polimer yang terpapar radiasi gamma. Interaksi awal antara sinar gamma dan rantai polimer melibatkan eksitasi dan ionisasi atom penyusun rantai, yang kemudian diikuti oleh pembentukan radikal bebas. Radikal ini sangat reaktif dan dapat mengalami rekombinasi membentuk ikatan silang (*cross-linking*) atau berinteraksi dengan oksigen membentuk produk oksidasi yang menyebabkan degradasi rantai polimer (Naikwadi et al., 2022).

Radiasi gamma berperan penting dalam rekayasa dan modifikasi struktur polimer karena mampu memicu pembentukan radikal bebas pada rantai polimer tanpa memerlukan bahan kimia tambahan. Efek utama yang ditimbulkan oleh paparan radiasi gamma terhadap polimer adalah pembentukan ikatan silang (*cross-linking*) yang memberikan ketahanan termal, kimia, dan mekanis yang lebih baik pada material. Namun, dalam kondisi tertentu radiasi gamma dapat

menginduksi degradasi rantai polimer yang terkendali, sehingga menghasilkan material yang lebih ringan, lebih mudah larut, atau biodegradable.

Kedua mekanisme ini sangat bergantung pada dosis serap radiasi (*absorbed dose*) serta struktur kimia polimer. Pada dosis sedang, radiasi gamma cenderung menghasilkan cross-linking, di mana radikal yang terbentuk dari pemutusan ikatan C–H atau C–C saling bereaksi membentuk jembatan kovalen antar rantai polimer. Proses ini meningkatkan stabilitas termal, kekakuan, dan ketahanan terhadap degradasi kimia. Sebaliknya, pada dosis tinggi, kelebihan energi menyebabkan degradasi rantai polimer, yaitu pemutusan ikatan utama dalam polimer yang mengakibatkan penurunan berat molekul dan melemahnya sifat mekanik (Azevedo et al., 2025).



Gambar 2. 1 Mekanisme efek radiasi gamma (Campbell et al, 1989)

Interaksi antara radiasi gamma dan polimer sangat dipengaruhi oleh struktur kimia dan keberadaan gugus fungsional dalam rantai polimer (Cota et al., 2007). Pada polimer seperti Poly (acrylic acid) (PAA), gugus fungsional karboksil

(-COOH) berperan penting dalam menentukan arah reaksi. Energi foton gamma dapat mengionisasi gugus ini menjadi radikal -COOH atau -C-O.

2.4 Mekanisme Radiolisis pada Polimer akibat Radiasi Gamma

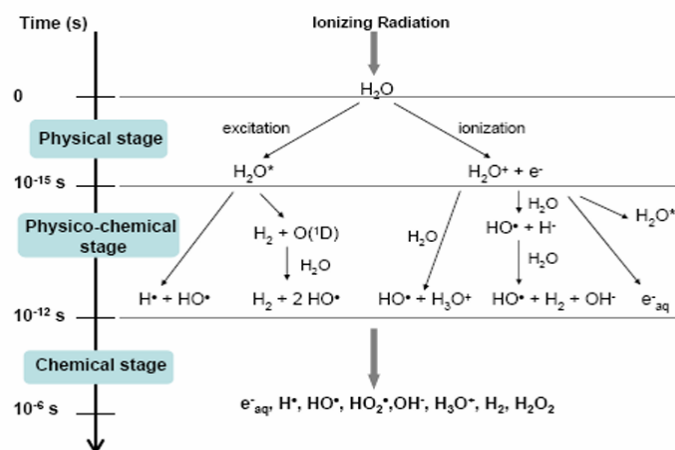
Radiolisis merupakan proses penguraian medium oleh radiasi pengion. Beberapa radiasi pengion yang dapat mengurai molekul antara lain radiasi α , β , γ dan neutron yang menembus material tersebut. Energi yang dibawa oleh partikel radiasi akan ditransfer ke molekul-molekul medium melalui proses *Linear Energy Transfer* (LET), sehingga menyebabkan terjadinya ionisasi dan pembentukan spesiess reaktif (Khakim, 2019). Secara umum, mekanisme radiolisis terbagi menjadi tiga tahapan utama, yaitu: tahap fisika, tahap kimia-fisika, dan tahap kimia (Rina et al., 2012).

Tahap fisik berlangsung sangat singkat, yaitu pada rentang waktu $0-10^{-15}$ detik, yang merepresentasikan skala waktu ultracepat terjadinya deposisi energi radiasi sebelum berlangsungnya reaksi kimia, sebagaimana ditunjukkan secara skematis pada Gambar 2.2. Pada tahap ini, radiasi gamma mentransfer energinya ke dalam molekul air sehingga menghasilkan molekul air terionisasi (H_2O^+), yaitu molekul air yang kehilangan satu elektron, molekul air tereksitasi (H_2O^*), yaitu molekul air dengan energi internal lebih tinggi dibandingkan keadaan dasarnya, serta elektron berenergi tinggi. Tahap ini belum melibatkan reaksi kimia, melainkan hanya interaksi fisik akibat deposisi energi radiasi pada medium (Ashfaq et al., 2021).

Tahap selanjutnya adalah tahap fisiko-kimia, yang terjadi pada rentang waktu 10^{-15} hingga 10^{-12} detik, yang menandai transisi dari interaksi fisik menuju pembentukan spesies kimia reaktif, sesuai dengan mekanisme yang ditampilkan

pada Gambar 2.2. Pada fase ini, molekul air yang terionisasi mengalami fragmentasi dan menghasilkan spesies reaktif. Elektron yang sebelumnya berenergi tinggi mengalami perlambatan dan terhidrasi membentuk elektron terhidrasi (e_{aq}^-), yaitu elektron bebas yang distabilkan oleh molekul air di sekitarnya. Pada waktu yang sama, terbentuk radikal hidroksil ($\bullet OH$) dan radikal hidrogen ($H\bullet$) sebagai hasil pemutusan molekul air, yang merupakan spesies reaktif utama dalam proses radiolisis. Pembentukan radikal-radikal ini merupakan awal dari proses kimia yang nantinya akan berinteraksi langsung dengan rantai polimer (Ashfaq et al., 2021).

Tahap kimia berlangsung pada rentang waktu 10^{-12} hingga 10^{-9} detik, yang merupakan fase di mana spesies reaktif hasil radiolisis telah cukup stabil untuk berdifusi dan bereaksi secara kimia dengan molekul lain di dalam medium. Pada tahap ini, radikal hidroksil ($\bullet OH$) sebagai spesies paling oksidatif akan mengabstraksi atom hidrogen dari rantai polimer sehingga menghasilkan radikal makromolekul ($R\bullet$), yaitu radikal yang terbentuk pada rantai utama polimer akibat kehilangan atom hidrogen. Radikal ini selanjutnya dapat mengalami rekombinasi intra- maupun intermolekul yang berperan dalam proses pembentukan ikatan silang (*cross-linking*) atau pemutusan rantai polimer, sebagaimana ditunjukkan pada skema reaksi radiolisis pada Gambar 2.2 (Izot et al., n.d., 2008).



Gambar 2. 2 Reaksi utama yang terjadi pada radiolisis (Khakim, 2019)

Secara keseluruhan, ketiga tahapan radiolisis ini menjelaskan bagaimana radiasi gamma mampu memicu perubahan kimia pada polimer melalui pembentukan radikal bebas. Pemahaman mekanisme ini menjadi penting dalam menjelaskan perubahan struktur pada polimer yang mengalami iradiasi, termasuk polimer seperti poly (acrylic acid) (PAA) (Ashfaq et al., 2021).

2.5 ORCA

ORCA merupakan paket program kimia kuantum yang dikembangkan sejak akhir 1990-an dan telah menjadi salah satu perangkat lunak yang banyak digunakan dalam perhitungan struktur elektronik molekul. Perangkat lunak ini mendukung berbagai metode komputasi, seperti Hartree–Fock (HF), *Density Functional Theory* (DFT), metode korelasi berbasis fungsi gelombang referensi tunggal, serta metode multi-referensi. Salah satu fitur penting dalam ORCA adalah modul *Ab Initio Born–Oppenheimer Molecular Dynamics* (AIMD) yang terintegrasi penuh dengan framework ORCA, sehingga memungkinkan simulasi trajektori dinamika molekul berdasarkan metode kuantum yang sama dengan perhitungan energi elektronik (Wennmohs et al., 2024).

Kombinasi metode AIMD yang dikombinasikan dengan DFT dalam ORCA memungkinkan kajian dinamika atomistik di bawah pengaruh kondisi eksternal seperti temperatur, tekanan, dan volume secara kuantum mekanik. Oleh karena itu, ORCA menjadi perangkat yang sesuai untuk mempelajari perubahan struktur dan dinamika sistem molekuler, termasuk dalam analisis respon material terhadap efek radiasi pada tingkat atomistik. ORCA dapat dijalankan pada berbagai platform termasuk Linux, MacOS, dan Windows (Wennmohs et al., 2024).

2.6 *Density Functional Teori (DFT)*

Density Functional Theory (DFT) adalah metode pencarian energi menggunakan kerapatan muatan (Alfianto, 2015). Teori ini merupakan pendekatan mekanika kuantum yang banyak digunakan untuk mempelajari sifat-sifat materi pada tingkat atom dan molekul. Dua konsep utama dalam DFT adalah Teorema Hohenberg–Kohn, yang menyatakan bahwa semua sifat sistem ditentukan oleh densitas elektron, dan Persamaan Kohn–Sham, yang menyederhanakan perhitungan sistem banyak elektron (Capelle, 2006).

Untuk memahami prinsip dasar *Density Functional Theory* (DFT), langkah awal yang penting adalah meninjau kembali konsep-konsep dasar mekanika kuantum, karena teori ini berakar langsung dari cara mekanika kuantum menjelaskan perilaku elektron dalam suatu sistem. Dalam mekanika kuantum, seluruh informasi mengenai suatu sistem tersimpan dalam fungsi gelombang Ψ , yang menggambarkan keadaan kuantum dari elektron-elektron tersebut.

Pada konteks ini, pembahasan difokuskan pada struktur elektronik atom, molekul, dan padatan, di mana pengaruh inti atau kisi kristal direpresentasikan sebagai potensial luar $v(r)$ yang bekerja pada elektron. Dengan demikian, fungsi

gelombang hanya bergantung pada koordinat elektron. Secara matematis, perilaku dan energi total sistem elektron ini dijelaskan melalui Persamaan Schrödinger, yang menjadi dasar utama dalam mekanika kuantum untuk menentukan hubungan antara fungsi gelombang, energi, dan potensial yang memengaruhi partikel (Capelle, 2006).

2.6.1 Persamaan Schrodinger Banyak Partikel

Persamaan Schrödinger pada sistem banyak partikel digunakan untuk menjelaskan perilaku kuantum seluruh elektron yang berinteraksi di dalam suatu atom atau molekul. Pemahaman bentuk umumnya sering diawali dari contoh paling sederhana, yaitu atom hidrogen, karena sistem satu elektron ini memberikan dasar mengenai fungsi gelombang, energi keadaan, dan pengaruh potensial inti sebelum konsepnya diterapkan pada sistem multi-elektron (Suprayoga et al., 2021). Persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen dituliskan sebagai berikut:

$$E_{tot}\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|r|}\psi(r) \quad (2.1)$$

Persamaan Schrödinger untuk sistem atom dengan banyak elektron dan inti menggambarkan bagaimana energi total sistem ditentukan melalui operator Hamiltonian H . dalam persamaan tersebut, H berperan sebagai operator yang mengatur dinamika system. Sedangkan E nilai eigen yang merepresentasikan energi totalnya. Bentuk lengkap dari operator Hamiltonian dituliskan pada persamaan berikut (Yakin et al., 2024) :

$$H = -\sum_{i=1} \frac{\nabla^2}{2} - \sum_{I=1} \frac{\nabla^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} \frac{1}{[r-r']} + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} \frac{zz'}{[R-R']} - \sum_{i,I} \frac{Z}{[r-R']} \quad (2.2)$$

2.6.2 Pendekatan Born-Oppenheimer

Persamaan (3) masih terlalu rumit untuk dipecahkan dan memerlukan pendekatan yang disederhanakan (Yakin, 2024). Dengan mempertimbangkan perbedaan massa yang signifikan antara inti dan elektron, kita dapat mengasumsikan $M \approx \infty$. Dapat juga diasumsikan bahwa elektron bergerak lebih cepat daripada inti dan bahwa gerakan inti diabaikan. Lebih lanjut, jarak inti $R-R'$ diasumsikan sangat besar (Wella et al., 2021). Oleh karena itu, bentuk T_n dan V_{nn} dihilangkan. Aproksimasi ini dikenal sebagai aproksimasi Born-Oppenheimer. Berdasarkan hal tersebut, persamaan Hamiltonian direpresentasikan sebagai persamaan berikut (Yakin, 2024):

$$H = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (2.4)$$

Sehingga persamaan yang baru dapat dinyatakan dengan persamaan sebagai berikut (wella et al.,2021):

$$H\psi = \left[-\sum_i \frac{\nabla^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r-r'|} + \frac{1}{2} \sum_{i,l} \frac{Z}{|r-R|} \right] \psi = E\psi \quad (2.5)$$

Meskipun persamaan (2.5) sudah sangat sederhana, masih diperlukan metode aproksimasi tereduksi untuk menyelesaikan nilai eigen (Yakin, 2024).

2.6.3 Aproksimasi Hartree-Fock

Aproksimasi Hartree-Fock digunakan untuk menyederhanakan banyak elektron dalam persamaan Schrodinger. Dengan tidak menganggap interaksi antar elektron ini, fungsi gelombang banyak partikel dapat dituliskan dengan lebih eksplisit (Wella et al., 2021):

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \phi(r_1)\phi(r_2) \dots \phi(r_n) \quad (2.6)$$

Sehingga persamaan Hartree dapat ditulis:

$$\left[-\sum_i \frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{2} \sum_{i,l} \frac{Z}{|r-R|} + \sum_{i \neq j} \int d^3 \frac{|\phi'(r')|^2}{|r-r'|} \right] \phi = E\phi(r) \quad (2.7)$$

Asas larangan pauli menyebutkan bahwa dua buah elektron dalam sebuah atom tidak dapat memiliki bilangan kuantum yang sama (tingkat energi), kecuali memiliki spin berbeda. Namun, aproksimasi Hartree tidak mengikutsertakan anti-simetri fungsi gelombang elektron. Padahal fungsi gelombang elektron harus anti-simetri terhadap pertukaran posisi dan spin (Wella et al., 2021).

Dengan menggunakan cara Slater Determinant, yaitu kombinasi linear dari *Hartree product* yang menghasilkan fungsi gelombang anti-simetris sesuai dengan prinsip larangan pauli:

$$\psi(r_1, r_2) = -\psi(r_2, r_1) \quad (2.8)$$

kita dapat menambahkan syarat anti-simetri dan muncullah kontribusi pertukaran (*exchange*). Sehingga persamaan Hartree-Fock menjadi (Wella et al., 2021):

$$\left[-\sum_i \frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{2} \sum_{i,l} \frac{Z}{|r-R|} + \sum_{i \neq j} \int d^3 r' \frac{|\phi'(r')|^2}{|r-r'|} \right] \phi - \left[\sum_j \int d^3 r' \frac{|\phi^*(r')\phi(r')|}{|r-r'|} \right] \phi' = E\phi(r) \quad (2.9)$$

2.6.4 Teorema Hohenberg-Kohn

DFT adalah teori struktur elektronik yang secara prinsip akurat, didasarkan pada distribusi kepadatan elektron $n(\vec{r})$, bukan pada fungsi gelombang banyak elektron $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ (W. Kohn, A. D. Becke, 1996). Hal ini muncul dari ide bahwa untuk suatu nilai tertentu $n(\vec{r})$, maka akan merepresentasikan fungsi gelombang yang tertentu pula. Secara umum, terdapat dua Hohenberg-Kohn

untuk menentukan operator Hamilton dan sifat-sifat sistem berdasarkan kerapatan elektron yang berbunyi (Rahman & Purqon, 2015):

Teorema 1. Suatu fungsi gelombang pada keadaan dasar (*Ground State Wave Function*) terdefinisi unik oleh suatu fungsional dari kerapatan dalam keadaan dasar (Ground State Density / $n_0(r)$)

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \Rightarrow \psi[n_0(r)] \quad (2.10)$$

Teorema 2. Kerapatan elektron dalam keadaan dasar dapat mendefinisikan secara unik energi total dalam keadaan dasar.

$$E[n_0] = \psi[n_0] | \hat{H} | \psi[n_0] \leq \psi[n'] = \psi[n'] | \hat{H} | \psi[n'] \quad (2.11)$$

2.6.5 Pendekatan Kohn-Sham

Kohn dan Sham mendefinisikan ulang permasalahan ini dalam bentuk yang lebih mudah dipahami, yang kemudian menghasilkan implementasi DFT yang praktis. Pendekatan Kohn-Sham digunakan untuk mengganti sistem elektron yang berinteraksi dengan sistem non-elektron yang dipengaruhi oleh potensial efektif. Potensial efektif mencakup potensial eksternal, interaksi Coulomb drantar elektron, serta interaksi pertukaran dan korelasi. Dengan menyelesaikan persamaan tersebut, kita dapat menentukan kerapatan dan energi keadaan dasar. Fungsional energi Kohn-Sham untuk keadaan dasar termasuk potensial eksternal dituliskan sebagai persamaan (Yakin, 2024):

$$E_{KS} = T_S[n] + \int V_{ext}(r) n(r) d^3r + E_H[n] + E_H[n] + E_{XC}[n] \quad (2.12)$$

Dengan,

$$T_S[n] = \sum_i \int \psi_i^*(r) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi_i(r) dr \quad (2.13)$$

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (2.14)$$

Di mana $T_S[n]$ adalah energi kinetik elektron yang tidak berinteraksi, $E_H[n]$ adalah energi Hartree dan $E_{XC}[n]$ merupakan energi *exchange-correlation*.

Energi *exchange-correlation* ini merupakan bentuk koreksi energi dari pendekatan Kohn-Sham. Energi *exchange* merupakan koreksi energi akibat dari dua partikel yang saling dipertukarkan. Sementara energi *correlation* merupakan koreksi energi berupa selisih energi antara sistem partikel yang saling berinteraksi dengan sistem partikel yang tidak saling berinteraksi (Rahman & Purqon, 2015).

Suatu sistem fisis akan selalu mengarah ke energi yang paling minimum. Maka dalam hal ini, minimalisasi energi dapat dilakukan dengan melakukan turunan terhadap kerapatan elektron, dengan menggunakan konstrain prinsip eksklusi pauli,

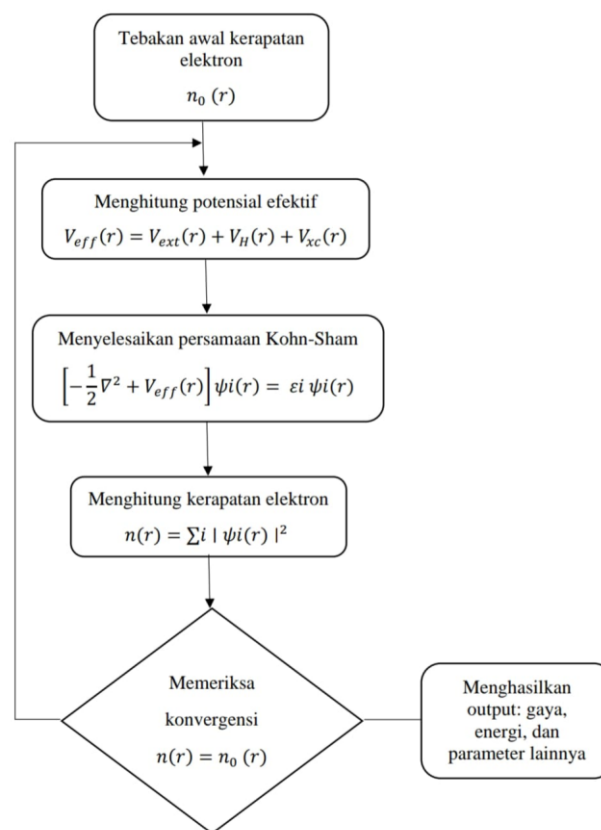
$$\frac{\partial}{\partial n(r)} (E[n] - \sum_i \lambda \int \phi_i^*(r) \phi_i(r) d^3r) = 0 \quad (2.15)$$

dengan menyelesaikan persamaan tersebut, akan diperoleh persamaan Kohn-Sham yang memiliki bentuk seperti persamaan schrodinger satu partikel (Rahman & Purqon, 2015):

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \int \frac{n(r')}{|r-r'|} d^3r + \frac{\partial E_{XC}[n]}{\partial n(r)} + E_H[n] \right) \phi_i[n] = \lambda \phi_i[n] \quad (2.16)$$

Untuk menyelesaikan persamaan Kohn-Sham ini, diperlukan suatu nilai tebakan kerapatan elektron dan kemudian dapat diperoleh solusi persamaan Kohn-Sham yang dapat digunakan untuk menghitung kerapatan elektron (Togatorop & Ahmad, 2024). Pada akhirnya dapat diperoleh kerapatan elektron baru untuk

digunakan menyelesaikan persamaan Kohn-Sham kembali. Hal ini membentuk siklus yang dinamakan *Self Consistent Field* (SCF). Jika siklus ini dilakukan berulang sehingga mendapat besaran kerapatan elektron yang konsisten, maka diperoleh kerapatan elektron pada keadaan dasar dengan energi yang minimal (Rahman & Purqon, 2015).



Gambar 2. 3 Skema perhitungan Density Functional Theory (DFT)

2.7 AIMD

Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) merupakan metode simulasi dinamika molekuler yang menggabungkan prinsip mekanika klasik dan mekanika kuantum untuk menggambarkan gerakan atom secara akurat tanpa menggunakan parameter empiris. Berbeda dengan simulasi dinamika molekuler klasik (classical molecular dynamics, MD) yang memanfaatkan *force field* atau parameter potensial

yang telah ditentukan sebelumnya, AIMD menghitung gaya antar atom secara langsung dari perhitungan kuantum melalui Density Functional Theory (DFT) sehingga disebut sebagai metode *first-principles* atau *parameter-free simulation* (Friedman et al., 2013).

Dalam aplikasi praktisnya, prosedur AIMD dimulai dari penyiapan struktur awal dan pemanasan sistem hingga mencapai kondisi setimbang. Gaya antarmolekul kemudian dihitung secara *on-the-fly* menggunakan metode DFT (Grotendorst, 2000). Hasil trajektori AIMD dapat dianalisis untuk menentukan berbagai karakteristik seperti fungsi distribusi radial, konfigurasi ikatan hidrogen, serta sifat spektros kopi melalui fourier transformasi fungsi auto korelasi dipol system (Wróbel et al., 2024).

Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) berawal dari prinsip yang sama dengan dinamika molekuler klasik (*Molecular Dynamics* (MD)). Pada MD konvensional, evolusi posisi atom dideskripsikan menggunakan hukum kedua Newton, di mana setiap inti mengikuti persamaan gerak:

$$M_I \ddot{R}_I = F_I \quad (2.17)$$

dengan M_I sebagai massa inti ke- I , $\ddot{R}_I$ posisi inti, dan F_I gaya total yang bekerja pada inti tersebut. Dalam pendekatan klasik, gaya ini diperoleh dari turunan negatif suatu potensial empiris (*force field*) sehingga:

$$F_I = -\nabla_{R_I} V_{emp}(R) \quad (2.18)$$

Walaupun metode ini efisien secara komputasi, ketergantungannya pada bentuk potensial yang telah ditentukan sebelumnya menimbulkan keterbatasan, terutama ketika sistem mengalami perubahan struktur elektronik yang signifikan. Force field klasik tidak dapat menggambarkan ionisasi, transfer elektron, reaksi

kimia, maupun proses radiasi. Oleh karena itu, AIMD mengganti potensial empiris dengan energi kuantum yang dihitung langsung dari Hamiltonian elektronik, sehingga gaya yang bertindak pada inti berasal dari sifat elektronik aktual sistem, bukan parameter yang dipaksakan (Rick, Steven W, A Stuart, 2002).

2.7.1 Born–Oppenheimer Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD)

Pendekatan Born-Oppenheimer memanfaatkan perbedaan signifikan antara massa elektron dan inti. Karena elektron jauh lebih ringan, diasumsikan bahwa pergerakan elektron menyesuaikan secara instan terhadap perubahan posisi inti. Dengan demikian, untuk setiap konfigurasi inti R , Hamiltonian elektronik $\hat{H}_e(R)$ dapat diselesaikan dengan (Paquet & Viktor, 2018):

$$\hat{H}_e(R)\psi_o(R) = E_o(R)\psi_o(R) \quad (2.19)$$

Berdasarkan pendekatan Born–Oppenheimer, energi total sistem dinyatakan sebagai:

$$E_{BO}(R) = E_o(R) + V_{NN}(R) \quad (2.20)$$

yang merupakan gabungan antara energi elektronik keadaan dasar dan energi repulsi inti–inti. Energi Born–Oppenheimer ini selanjutnya digunakan sebagai potensial dalam gerak inti, sehingga gaya F_I diperoleh dari turunan energi ini terhadap posisi inti. Persamaan lengkap AIMD–Born–Oppenheimer dapat dituliskan sebagai (Iftimie et al., 2005):

$$M_I \ddot{R}_I = -\nabla_{R_I} [\langle \psi_o(R) | \hat{H}_e(R) | \psi_o(R) \rangle + V_{NN}(R)] \quad (2.21)$$

Persamaan ini menunjukkan bahwa gaya pada inti berasal langsung dari permukaan energi potensial kuantum yang diperbarui *on-the-fly* pada setiap langkah

simulasi. Dengan demikian, BOMD menghasilkan trajektori atom yang sepenuhnya konsisten dengan evolusi struktur elektronik system (Iftimie et al., 2005).

Keunggulan fundamental AIMD terletak pada kemampuan nya menangkap efek elektronik secara eksplisit sehingga dapat menelusuri fenomena kimia kompleks secara akurat, termasuk reaksi kimia, reorganisasi elektronik, dan polarisasi, yang tidak tercakup dalam pendekatan berbasis *force-field*. AIMD secara alami mengakomodasi proses pemutusan maupun pembentukan ikatan serta interaksi elektron–inti secara dinamis. Dalam konteks radiasi, kemampuan AIMD untuk memodelkan evolusi elektron dan inti memungkinkan studi reaksi yang dipicu oleh ionisasi dan eksitasi elektron, termasuk generasi radikal serta jalur dekomposisi kimia (Iftimie et al., 2005).

BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Jenis Penelitian

Dalam penelitian ini, jenis penelitian yang digunakan adalah penelitian kuantitatif dengan pendekatan simulasi komputasi. Metode simulasi digunakan untuk menganalisis dan mengevaluasi mekanisme radiolisis gugus karboksil pada Poly (acrylic acid) *interface* akibat radiasi gamma pada *drug delivery system*. Parameter yang digunakan dalam analisis ini meliputi probabilitas jumlah ionisasi, perubahan kerapatan elektron pada gugus karboksil, serta proses mekanisme radiolisis secara keseluruhan.

Analisis dilakukan menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) untuk menggambarkan secara mendetail perubahan struktur geometri dan sifat elektronik acrylic acid *interface* setelah proses ionisasi akibat radiasi gamma.

3.2 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di laboratorium medan magnet UIN Maulana Malik Ibrahim Malang. Pengambilan data dilakukan selama periode Oktober sampai Mei 2026, sehingga diharapkan data yang dibutuhkan dapat terkumpul dengan baik dan lengkap.

3.3 Alat dan Bahan

3.3.1 Perangkat Keras

Penelitian ini dilakukan melalui pemodelan dan simulasi yang dijalankan menggunakan laptop dan komputer, dengan spesifikasi perangkat yang ditampilkan pada Tabel 3.1.

Tabel 3.1 Klasifikasi perangkat keras penelitian

	Spesifikasi	Keterangan
Laptop	Merk	Lenovo LAPTOP-ESD68VCI IdeaPad 3 14IAU7
	Processor	12th Gen Intel(R) Core (TM) i3-1215U (1.20 GHz)
	RAM SSD	8,00 GB (7,73 GB usable)
	Versi windows	Windows 11 Home Single Language 24H2 64-bit
Workstation	Processor	intel ^(R) xeon (R) CPU E-5 v3 @ 2.30GHz x 64
	Memory	62,8 GiB

3.3.2 Perangkat Lunak

Untuk menjalankan simulasi ini, diperlukan beberapa perangkat lunak pendukung. perangkat lunak yang digunakan dapat dilihat pada Tabel 3.2.

Tabel 3.2 Perangkat Lunak Penelitian

Nama	Keterangan Fungsi
ORCA 6.0.0	untuk menggambarkan secara detail perubahan struktur dan sifat elektronik PAA setelah proses ionisasi menggunakan metode AIMD yang dikombinasi dengan DFT
Avogadro 1.2.0	Untuk Pemodelan dan visualisasi struktur molekul
Vesta 3.90.5a	Visualisasi struktur dan hasil komputasi terkait PAA interface
Notepad	untuk melihat, membaca, dan menyiapkan data sebelum diolah lebih lanjut di Excel.
Microsoft Excel	Untuk mengolah data angka yang didapatkan dari running program
Microsoft word	Untuk menulis hasil penelitian
GNU Plot	untuk mengolah dan menampilkan data numerik dalam bentuk grafik ilmiah.

3.3.3 Variabel Penelitian

Variabel yang digunakan dalam penelitian ini, yaitu:

1. Variabel Bebas

Variabel bebas dalam simulasi ini adalah jumlah ionisasi dan *interface*.

2. Variabel Terikat

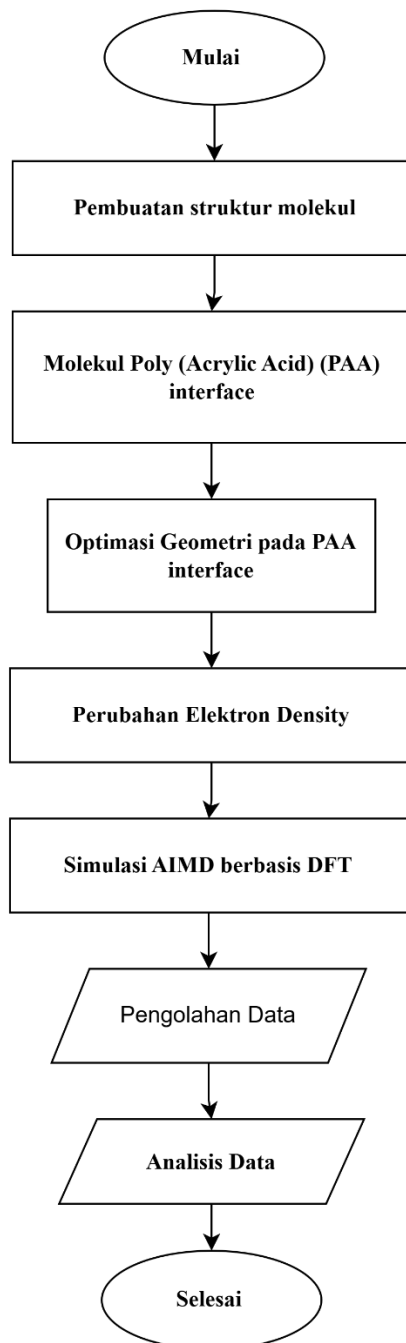
Variabel terikat adalah distribusi elektron sekunder, dan pemutusan gugus COOH pada PAA. Variabel ini diukur dari hasil simulasi PHITS dan AIMD.

3. Variabel Kontrol

Variabel kontrol meliputi struktur molekul PAA (geometri awal), energi sinar gamma dan kondisi batas simulasi agar hasil dapat dibandingkan secara konsisten.

3.3.4 Diagram Alir Penelitian

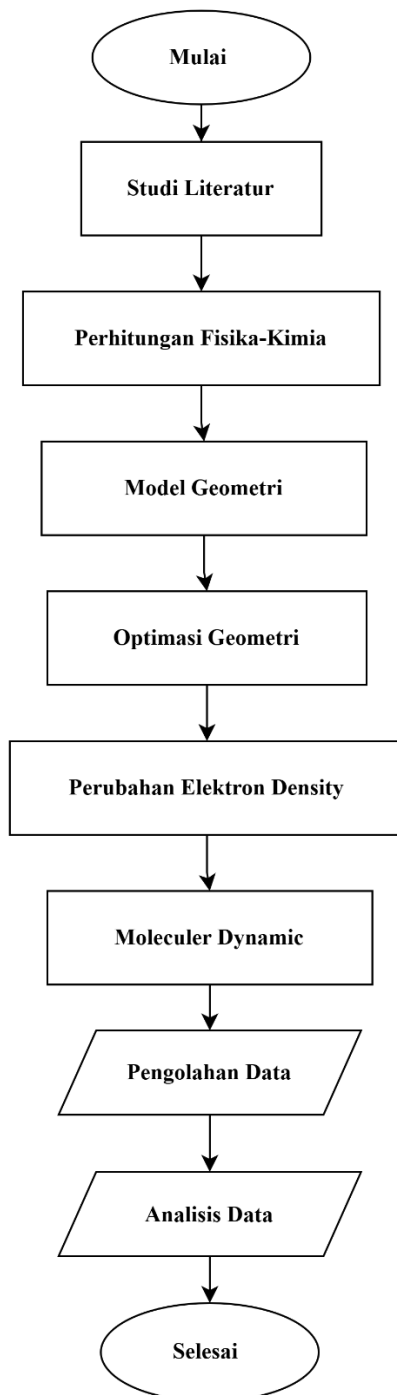
Tahap penelitian dalam penelitian ini, adalah:



Gambar 3.1 Diagram alir penelitian

3.3.5 Diagram Alir Perhitungan

Tahap perhitungan dalam penelitian ini, adalah:



Gambar 3.2 Diagram alir perhitungan

3.4 Prosedur Penelitian

3.4.1 Pembuatan Model Geometri Acrylic Acid *interface*

Buka aplikasi Avogadro, pilih menu Draw setting kemudian buat struktur PAA yang terdiri dari 4 atom carbon (C), 6 atom hydrogen (H) dan 2 atom oxygen (O). selanjutnya, pastikan setiap atom tersebut terikat dengan valensi yang benar, atom-atom harus membentuk ikatan tunggal dan rangkap yang sesuai untuk memperoleh ikatan stabil, setelah struktur dasar terbentuk, geometri molekul dioptimasi menggunakan fungsi optimize geometry yang terdapat pada menu Extensions.

3.4.2 Optimasi Geometri pada Acrylic Acid *interface*

1. siapkan file (.inp) dengan langkah-langkah berikut:
 - a. Perhitungan dilakukan dengan metode DFT menggunakan ORCA 6.0.0 dengan fungsional CAM-B3LYP dan basis set 6-311++G **, serta koreksi dispersi DFT-D4 untuk memperoleh struktur geometri minimum dan distribusi elektron pada molekul Acrylic Acid *interface*. Perhitungan dijalankan dengan Normal SCF.
 - b. Blok %geom dan %scf berfungsi untuk mengontrol proses komputasi. MaxIter 300 di %geom mengatur bahwa ORCA akan mencoba hingga 300 langkah untuk mencapai geometri yang stabil (terkonvergensi). Demikian pula, MaxIter 300 di %scf memberikan hingga 300 iterasi agar densitas elektron dapat tercapai.
 - c. Blok %maxcore 3000 mengalokasikan 3000 MB memori utama per prosesor untuk perhitungan.

- d. Blok `%pal` dengan `nprocs 10` menentukan bahwa simulasi akan menggunakan 10 core CPU untuk mempercepat waktu komputasi.
 - e. Blok `* xyz 0 1` angka 0 menunjukkan muatan total molekul adalah nol (netral). Angka 1 menunjukkan multiplisitas spin dalam keadaan singlet. Blok berikutnya menunjukkan koordinat atom dalam format `(.xyz)`.
2. Jalankan perhitungan melalui terminal, dengan Langkah-langkah berikut:
 - a. Buka aplikasi Terminal
 - b. Arahkan terminal ke folder tempat file `(.inp)` berada.
 - c. Jalankan ORCA dengan memanggil executable diikuti nama file `(.inp)` > nama file `(.out)`.
 - d. Tekan enter untuk menjalankan ORCA
 3. Periksa file `(.out)` untuk memastikan hasil optimasi berhasil dan telah terpenuhi.

3.4.3 Perubahan Elektron Density

1. Siapkan file `(.inp)` untuk optimasi geometri sesuai format perhitungan ORCA.
2. Pada blok `%geom`, tambahkan perintah “`constrinst`” sesuai jumlah atom untuk mempertahankan jaraknya tetap konstan selama proses optimasi.
3. Pada blok `* xyz`, nilai muatan total dan multisiplitas spin disesuaikan dengan keadaan ionisasi molekul.
4. Jalankan optimasi melalui terminal menggunakan perintah ORCA.
5. Setelah optimasi selesai, periksa keberadaan file `(.gbw)` dan buka terminal baru.

6. Arahkan terminal ke direktori tempat file (.gbw) berada, kemudian jalankan kode “orca_plot nama file .gbw -i”.
7. Pilih menu 5. Select output file, lalu tekan Enter.
8. Pilih 7. Gaussian cube, lalu tekan Enter.
9. Pilih 1. Enter type of plot, kemudian tekan Enter.
10. Pilih 2. (SCF) electron density, lalu tekan Enter.
11. Ketik “y” untuk konfirmasi, lalu tekan Enter.
12. Pilih 11. Generate the plot, lalu tekan Enter.
13. Setelah proses selesai, pastikan file (.cube) telah muncul di direktori kerja.
14. Bandingkan file (.cube) molekul netral dengan seluruh file (.cube) molekul menggunakan tautan https://cubesuite.streamlit.app/Subtract_Cube_Files
15. Visualisasi hasil perbandingan dilakukan menggunakan perangkat lunak VESTA.

3.5 Pengambilan Data

1. Hasil geometri

Pengambilan data hasil geometri dilakukan setelah proses optimasi struktur. Optimasi ini bertujuan memperoleh bentuk geometri paling stabil dari setiap model, yaitu monomer acrylic acid, dimer acrylic acid *interface*, dan trimer acrylic acid *interface*, baik pada kondisi netral maupun bermuatan.

Tabel 3.3 Hasil gambar perhitungan geometri

Jenis molekul	Hasil Geometri
PAA	
2PAA <i>interface</i>	
3PAA <i>interface</i>	

2. Perubahan elektron density

Data perubahan densitas elektron antara keadaan netral dan ionisasi (+1, +2 dan +3) dihitung dengan metode CAM-B3LYP/6-311++G**

Tabel 3.4 Perubahan elektron density pada monomer acrylic acid

Ionisasi	Deskripsi Perubahan Densitas Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +3	

Tabel 3.5 Perubahan elektron density pada dimer acrylic acid
interface

Ionisasi	Deskripsi Perubahan Densitas Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +3	

Tabel 3.6 Perubahan elektron density pada trimer acrylic acid
interface

Ionisasi	Deskripsi Perubahan Densitas Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +3	

3. Hasil Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD)

Waktu disosiasi ikatan diperoleh dari simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) untuk mengamati ketahanan ikatan C–C dan O–H pada masing-masing model. Analisis ini dilakukan pada keadaan netral maupun bermuatan untuk melihat bagaimana penambahan muatan mempengaruhi stabilitas struktur.

Tabel 3.7 Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada monomer acrylic acid dalam keadaan netral dan bermuatan

Ionisasi	O-H	C-C
Netral		
+1		
+2		
+3		

Tabel 3.8 Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada dimer acrylic acid *interface* dalam keadaan netral dan bermuatan.

Ionisasi	O-H	C-C
Netral		
+1		
+2		
+3		

Tabel 3.9 Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada trimer acrylic acid *interface* dalam keadaan netral dan bermuatan.

Ionisasi	O-H	C-C
Netral		
+1		
+2		
+3		

BAB IV

HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

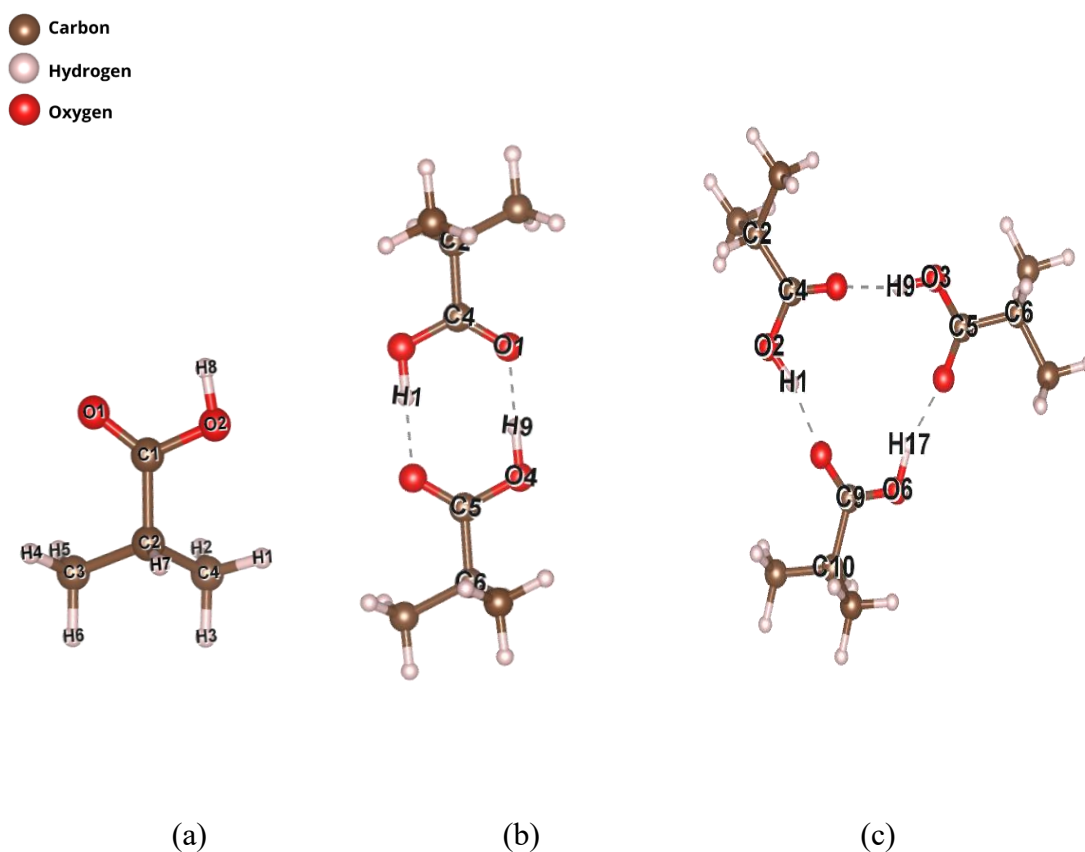
4.1. Hasil Penelitian

Penelitian ini dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) melalui perangkat lunak ORCA versi 6.0.0 untuk mengkaji mekanisme radiolisis pada acrylic acid (AA) *interface*. Tiga variasi model struktur digunakan dalam penelitian ini, yaitu monomer acrylic acid, dimer acrylic acid *interface*, dan trimer acrylic acid *interface*, yang masing-masing dianalisis pada kondisi muatan netral, +1, +2, +4, dan +6 untuk merepresentasikan berbagai tingkat ionisasi akibat paparan radiasi gamma. Optimasi struktur dilakukan menggunakan fungsional CAM-B3LYP dengan basis set 6-311++G** serta koreksi dispersi DFT-D4 guna memperoleh konfigurasi dengan energi paling stabil. Analisis difokuskan pada perubahan struktur geometri dan distribusi kerapatan elektron, khususnya pada gugus karboksil (–COOH) yang paling rentan mengalami ionisasi dan pemutusan ikatan akibat paparan radiasi. Hasil penelitian disajikan secara bertahap, dimulai dari pemodelan geometri molekul, dilanjutkan dengan kajian distribusi kerapatan elektron pada berbagai tingkat ionisasi, serta identifikasi mekanisme radiolisis pada masing-masing model struktur.

4.1.1 Model Geometri Acrylic Acid *Interface*

Pemodelan geometri acrylic acid *interface* merupakan tahap awal dalam penelitian ini yang bertujuan untuk memperoleh model molekul paling stabil sebelum dilakukan analisis lebih lanjut menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD). Model molekul acrylic acid *interface* dibuat menggunakan

perangkat lunak Avogadro melalui penyusunan unit monomer asam akrilat yang terdiri atas atom karbon (C), hidrogen (H), dan oksigen (O), dengan gugus karboksil ($-\text{COOH}$) sebagai pusat reaktivitas utama. Optimasi geometri selanjutnya dilakukan berbasis Density Functional Theory (DFT) menggunakan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-311++G**, dan koreksi dispersi DFT-D4 melalui perangkat lunak ORCA versi 6.0.0.



Gambar 4.1 Hasil struktur optimasi geometri (a) monomer Acrylic Acid, (b) dimer Acrylic Acid *interface*, dan (c) trimer Acrylic Acid *interface* yang diperoleh berdasarkan perhitungan Density Functional Theory (DFT) menggunakan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-31++G**, serta koreksi dispersi DFT-D4

Berdasarkan Gambar 4.1 menunjukkan bahwa hasil optimasi geometri pada model monomer, dimer dan trimer acrylic acid *interface*, berhasil diperoleh dalam konfigurasi yang stabil dengan karakteristik struktur yang berbeda-beda, khususnya

pada bagian gugus karboksil ($-\text{COOH}$) dan panjang ikatan antaratomnya. Pada model monomer, interaksi yang terbentuk bersifat intramolekul dengan satu rantai polimer tunggal. Sementara itu, pada model dimer dan trimer acrylic acid *interface*, dua hingga tiga rantai polimer disusun saling berdekatan untuk menggambarkan kondisi interaksi antarmolekul pada skala *interface*, di mana posisi dan jarak antar rantai disesuaikan agar interaksi antargugus karboksil ($-\text{COOH}$) dapat terbentuk secara optimal. Untuk melihat perubahan panjang ikatan yang terjadi setelah proses optimasi, dilakukan analisis panjang ikatan C–C dan O–H pada ketiga model. Hasil analisis tersebut disajikan pada Tabel 4.1 berikut.

Tabel 4.1 Panjang ikatan C–C dan O–H hasil optimasi geometri DFT pada monomer, dimer, dan trimer Acrylic Acid *interface*.

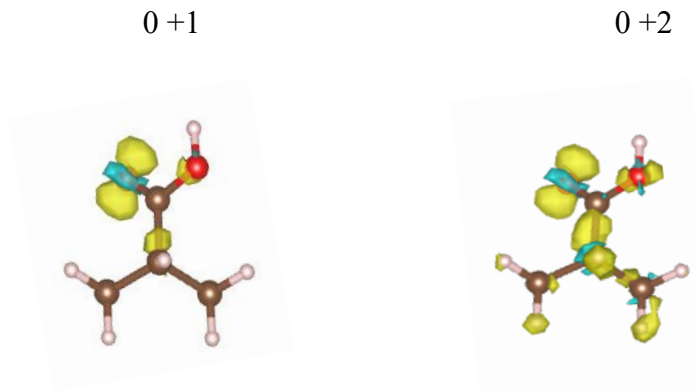
Jenis ikatan	Monomer Acrylic Acid (Å)	Dimer Acrylic Acid <i>interface</i> (Å)	Trimer Acrylic Acid <i>interface</i> (Å)	Nilai referensi (Å)
C1-C2	1,51	-	-	1,52
C2-C4	-	1,50	1,51	
C5-C6	-	1,50	1,51	
C9-C10	-	-	1,51	
O2-H8	0,96	-	-	0,96
O2-H1	-	0,99	0,98	
O4-H9	-	0,99	-	
O8-H9	-	-	0,98	
O6-H17	-	-	0,98	

Tabel 4.1 menunjukkan bahwa panjang ikatan C–C pada seluruh model, baik monomer, dimer, maupun trimer acrylic acid *interface*, memiliki nilai yang relatif konsisten sebesar 1,50-1,51 Å pada setiap rantai polimernya. Berbeda dengan ikatan C–C, panjang ikatan O–H pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$) menunjukkan adanya variasi antara monomer dan struktur *interface*. Pada monomer acrylic acid, panjang ikatan O–H diperoleh sebesar 0,96 Å, sedangkan struktur dimer acrylic acid *interface* menunjukkan panjang ikatan O–H mengalami pemanjangan menjadi

0,99 Å pada kedua rantai polimernya, sedangkan pada struktur trimer acrylic acid *interface* panjang ikatan O–H berada pada nilai 0,98 Å untuk ketiga rantai polimernya. Model geometri monomer, dimer, dan trimer acrylic acid *interface* yang telah dioptimasi dan berada pada kondisi paling stabil tersebut selanjutnya digunakan sebagai struktur awal untuk menganalisis pengaruh ionisasi terhadap distribusi kerapatan elektron pada gugus karboksil.

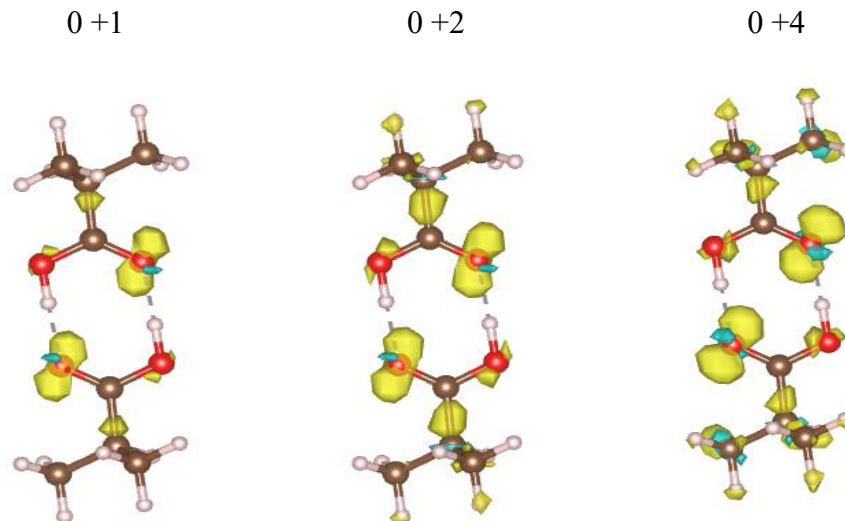
4.1.2 Distribusi Kerapatan Elektron pada acrylic acid *Interface*

Analisis keadaan ionisasi pada acrylic acid *interface* dilakukan untuk memahami pola distribusi kerapatan elektron pada berbagai tingkat ionisasi serta kestabilan struktur molekul akibat paparan radiasi gamma. Ionisasi dalam penelitian ini dimodelkan melalui pengurangan jumlah elektron dari sistem secara bertahap, yang menghasilkan kondisi muatan netral, +1, +2, +4, dan +6, di mana setiap tingkat ionisasi merepresentasikan jumlah elektron yang terlepas dari molekul. Pengurangan jumlah elektron tersebut berdampak pada perubahan sifat elektronik, distribusi muatan, dan kekuatan ikatan kimia dalam acrylic acid, khususnya pada gugus karboksil (–COOH) yang merupakan bagian paling rentan mengalami perubahan akibat proses ionisasi. Untuk melihat bagaimana pola redistribusi elektron terjadi pada unit terkecil, analisis dimulai dari sistem monomer. Sebagai langkah awal, analisis dilakukan pada sistem monomer yang merupakan model paling sederhana untuk melihat bagaimana redistribusi elektron terjadi sebelum adanya interaksi antarrantai.



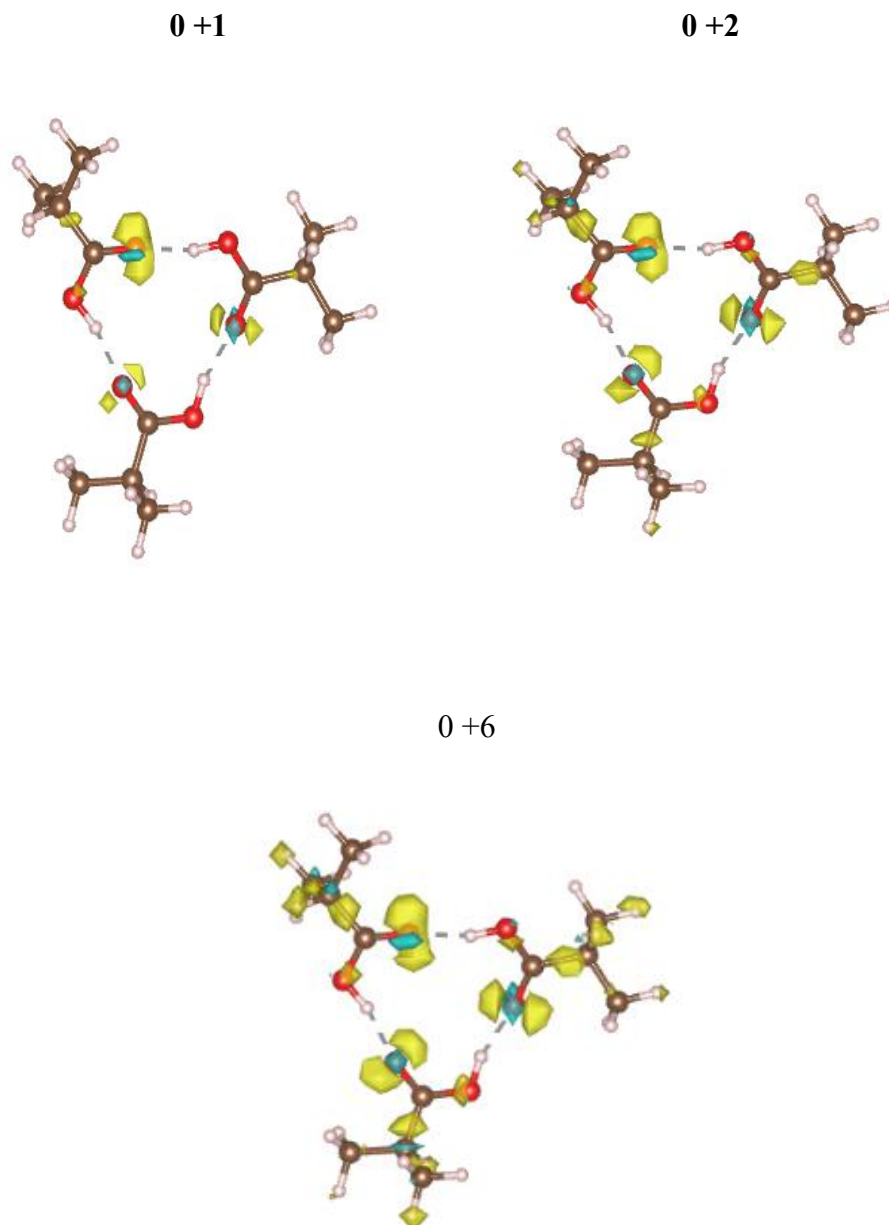
Gambar 4.2 Visualisasi pola distribusi kerapatan elektron pada monomer Acrylic Acid akibat ionisasi pada keadaan netral, +1 dan +2, warna kuning (pengurangan kerapatan elektron), warna biru (peningkatan kerapatan elektron). Perhitungan dilakukan menggunakan metode Density functional theory (DFT) dengan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-311++G**, dan koreksi dispersi DFT-D4

Pada Gambar 4.2 menunjukkan kondisi ionisasi +1, Dimana disribusi kerapatan elektron mulai terdeteksi di sekitar gugus karboksil ($-\text{COOH}$), terutama pada ikatan $\text{O}-\text{H}$ dan $\text{C}-\text{C}$, yang mengindikasikan bahwa gugus karboksil merupakan bagian yang paling awal mengalami redistribusi elektron akibat pelepasan elektron. Pada kondisi ionisasi +2, daerah pengurangan kerapatan elektron semakin meluas terutama di sekitar ikatan $\text{O}-\text{H}$, yang menunjukkan pelemahan ikatan yang lebih signifikan dibandingkan kondisi ionisasi +1. Hasil ini menunjukkan bahwa pada monomer acrylic acid, pengaruh ionisasi masih terpusat di sekitar gugus karboksil dan belum merambat ke rantai utama molekul. Setelah pola redistribusi elektron pada monomer diketahui, analisis diperluas ke sistem dimer acrylic acid interface guna melihat pengaruh interaksi antara dua rantai monomer terhadap distribusi elektron, seperti yang ditampilkan pada Gambar 4.3.



Gambar 4.3 Pola distribusi kerapatan elektron pada dimer Acrylic Acid *interface* akibat ionisasi pada keadaan netral, +1, +2, dan +4, di mana warna kuning menunjukkan pengurangan kerapatan elektron dan warna biru menunjukkan peningkatan kerapatan elektron. Perhitungan dilakukan menggunakan metode *Density Functional Teori* (DFT) dengan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-311++G**, dan Koreksi dispersi DFT-D4.

Berdasarkan Gambar 4.3 menunjukkan pada kondisi ionisasi 0 +1, distribusi kerapatan elektron mulai terlokalisasi di sekitar gugus karboksil ($-\text{COOH}$), di daerah *interface* antara dua rantai monomer acrylic acid. Pada ionisasi 0 +2, redistribusi elektron semakin meluas dan mulai memengaruhi daerah interaksi antarrantai, mengindikasikan bahwa kehilangan elektron tidak hanya berdampak pada gugus karboksil secara lokal, tetapi juga mulai mengganggu kestabilan elektronik pada daerah *interface*. Sementara itu, pada kondisi ionisasi +4, distribusi kerapatan elektron terlihat lebih besar dan telah menyebar hingga ke rantai utama monomer acrylic acid, menunjukkan bahwa semakin tinggi tingkat ionisasi, semakin luas penyebaran gangguan elektronik pada sistem dimer. Untuk melihat lebih jauh bagaimana penambahan jumlah rantai memengaruhi pola distribusi elektron, analisis kemudian dilakukan pada sistem trimer acrylic acid *interface*, sebagaimana ditunjukkan pada Gambar 4.4.



Gambar 4.4 Pola distribusi kerapatan elektron pada trimer Acrylic Acid *interface* akibat ionisasi pada keadaan netral, +1, +2 dan +6, di mana warna kuning menunjukkan pengurangan kerapatan elektron dan warna biru menunjukkan peningkatan kerapatan elektron. Perhitungan dilakukan menggunakan metode *Density Functional Teori* (DFT) dengan Fungsional CAM-B3LYP, Basis set 6-311++G**, dan koreksi dispersi DFT-D4.

Berdasarkan Gambar 4.4 menunjukkan bahwa pada kondisi ionisasi +1, distribusi kerapatan elektron mulai terlokalisasi di sekitar gugus karboksil (–

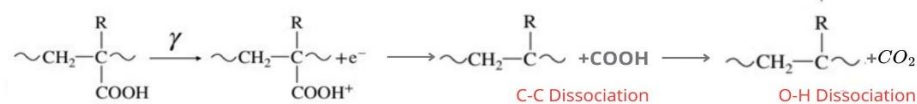
COOH), terutama pada ikatan O–H dan C–C di daerah *interface* antara ketiga rantai acrylic acid, yang menunjukkan bahwa gugus karboksil merupakan bagian yang paling awal mengalami redistribusi elektron akibat ionisasi. Pada kondisi ionisasi +2, redistribusi kerapatan elektron semakin meluas hingga menyebar ke beberapa bagian rantai utama acrylic acid, mengindikasikan bahwa kompleksitas interaksi antarrantai pada sistem trimer mempercepat penyebaran gangguan elektronik dibandingkan sistem monomer dan dimer pada tingkat ionisasi yang sama. Sementara itu, pada kondisi ionisasi +6, distribusi kerapatan elektron terlihat jauh lebih besar dan telah tersebar hampir ke seluruh struktur trimer acrylic acid *interface*, baik pada gugus karboksil maupun rantai utama molekul, yang mengindikasikan bahwa kestabilan elektronik sistem menurun secara signifikan seiring meningkatnya tingkat ionisasi.

Secara keseluruhan, hasil analisis distribusi elektron pada ketiga model, yaitu monomer, dimer, dan trimer acrylic acid *interface*, menunjukkan bahwa gugus karboksil (–COOH) selalu menjadi daerah yang paling awal mengalami redistribusi elektron akibat ionisasi. Seiring meningkatnya tingkat ionisasi, perubahan distribusi elektron semakin meluas, tidak hanya terbatas pada gugus karboksil, tetapi juga merambat ke rantai utama molekul. Selain itu, semakin banyak jumlah rantai yang berinteraksi, semakin luas pula penyebaran redistribusi elektron yang terjadi. Hal ini menunjukkan bahwa gugus karboksil merupakan bagian molekul yang paling responsif terhadap ionisasi, yang selanjutnya akan dibahas lebih mendalam melalui analisis mekanisme radiolisis pada acrylic acid *interface*.

4.1.3 Mekanisme Radiolisis Gugus Karboksil pada Acrylic Acid *Interface*

Analisis mekanisme radiolisis dilakukan untuk memahami bagaimana ionisasi akibat paparan radiasi gamma menyebabkan pemutusan ikatan kimia pada struktur acrylic acid *interface*. Fokus analisis diarahkan pada dua jenis ikatan yang paling rentan, yaitu ikatan C–C dan O–H pada gugus karboksil, yang diamati melalui perubahan panjang ikatan terhadap waktu simulasi. Analisis ini mencakup tiga model sistem, yaitu monomer, dimer, dan trimer acrylic acid interface, yang masing-masing disimulasikan pada kondisi netral, ionisasi +1, +2, +4, dan +6 menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.0.

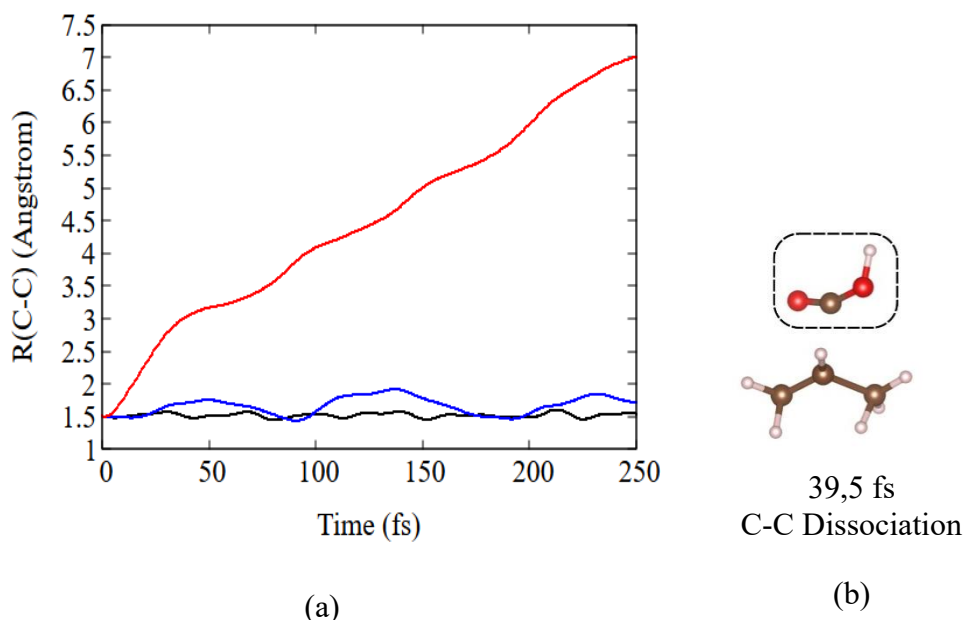
Sebelum membahas hasil simulasi pada masing-masing model, perlu dipahami terlebih dahulu bagaimana mekanisme radiolisis berlangsung secara umum.



Gambar 4.5 Mekanisme radiolisis gugus karboksil pada acrylic acid *interface* akibat radiasi gamma

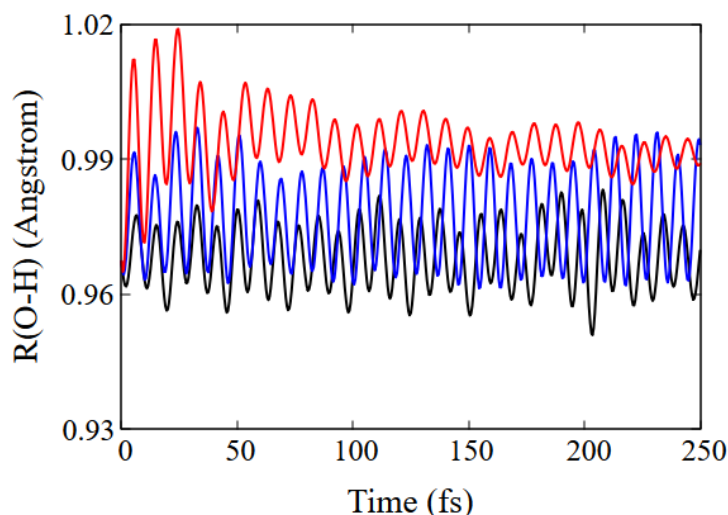
Berdasarkan Gambar 4.5 menunjukkan bahwa proses radiolisis diawali oleh ionisasi yang menyebabkan pelepasan elektron dari sistem. Kondisi terionisasi ini kemudian memicu pemutusan ikatan C–C sehingga gugus karboksil terlepas dari rantai utama molekul. Gugus karboksil yang terlepas selanjutnya mengalami pemutusan ikatan O–H yang menghasilkan produk degradasi berupa CO₂. Mekanisme umum ini kemudian dikaji secara lebih rinci melalui simulasi AIMD pada masing-masing model sistem.

Untuk melihat bagaimana mekanisme radiolisis terjadi pada sistem paling sederhana, analisis pertama dilakukan pada model monomer acrylic acid.



Gambar 4.6 (a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada monomer Acrylic Acid dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.0 (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +2 pada waktu 39,5 fs.

Berdasarkan Gambar 4.5 pada kondisi netral (garis hitam), panjang ikatan C–C relatif stabil di sekitar 1,5 Å sepanjang waktu simulasi. Pada kondisi ionisasi +1 (garis biru), panjang ikatan C–C sedikit meningkat namun masih berada di kisaran 1,5–2,0 Å, pada kondisi ionisasi +2 (garis merah), peningkatan panjang ikatan C–C terjadi secara drastis sejak awal simulasi, di mana jarak ikatan meningkat hingga mencapai 7,0 Å pada akhir simulasi dengan waktu disosiasi tercatat pada 39,5 fs. Selanjutnya, untuk melihat apakah ikatan O–H juga mengalami pemutusan pada kondisi yang sama, berikut ditampilkan grafik perubahan panjang ikatan O–H pada monomer.



Gambar 4.7 Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada monomer Acrylic Acid dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.0.

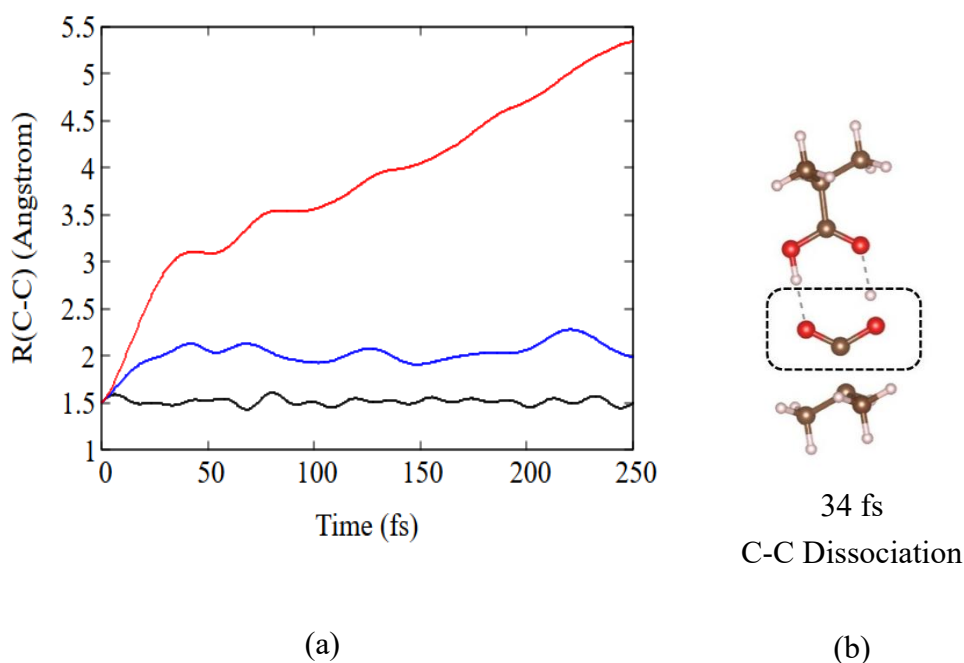
Berdasarkan Gambar 4.6 menunjukkan bahwa pada kondisi ionisasi pada ikatan O–H monomer memperlihatkan pola yang relatif serupa, di mana panjang ikatan hanya mengalami fluktuasi kecil dan tetap stabil di sekitar 1,0 Å sepanjang waktu simulasi. Hal ini menunjukkan bahwa pada sistem monomer, ionisasi hingga +2 belum mampu menyebabkan pemutusan ikatan O–H. Hasil selengkapnya mengenai waktu disosiasi ikatan C–C dan O–H pada monomer dirangkum dalam tabel berikut.

Tabel 4.2 Waktu disosiasi ikatan (dalam fs) pada ikatan C–C dan O–H monomer Acrylic Acid dalam keadaan netral dan bermuatan.

Ionisasi	Waktu disosiasi O-H (fs)	Waktu disosiasi C-C (fs)
Netral	-	-
+1	-	-
+2	-	39,5

Berdasarkan Tabel 4.2 menunjukkan bahwa pada kondisi netral dan ionisasi +1, tidak teramati pemutusan ikatan baik pada C–C maupun O–H. Pemutusan ikatan

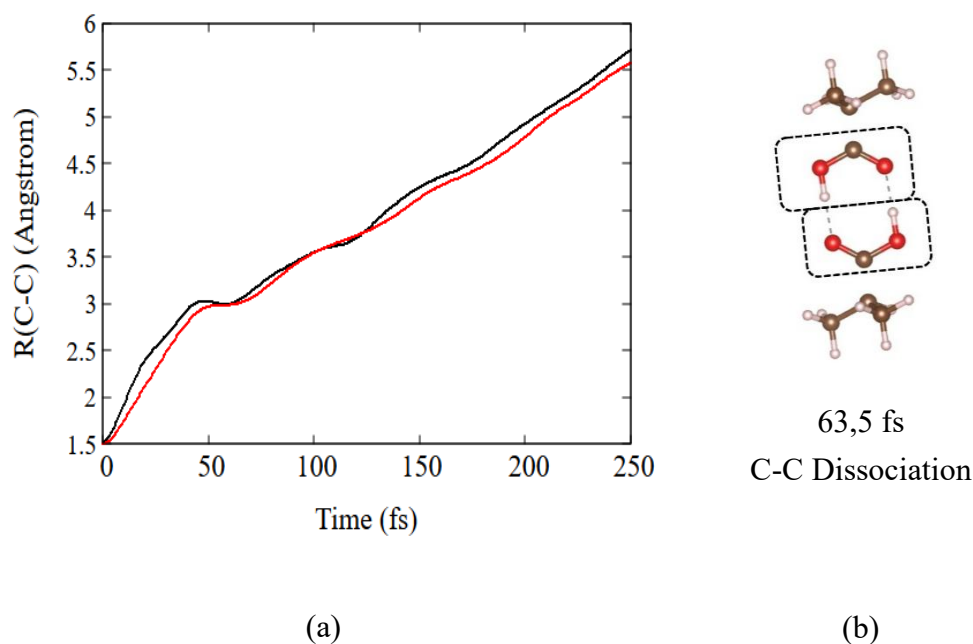
C–C pertama kali terjadi pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 39,5 fs, sedangkan ikatan O–H tidak mengalami pemutusan pada seluruh kondisi ionisasi yang diuji. Hasil ini menunjukkan bahwa pada sistem monomer, ikatan C–C lebih rentan terhadap ionisasi dibandingkan ikatan O–H. Untuk melihat apakah pola yang sama terjadi ketika dua rantai monomer berinteraksi, analisis dilanjutkan pada model dimer acrylic acid *interface*.



Gambar 4.8 (a) Grafik Perubahan panjang ikatan C-C pada dimer Acrylic Acid Interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +2 pada waktu 34 fs.

Berdasarkan Grafik pada Gambar 4.7, Pada kondisi netral, panjang ikatan C–C stabil di sekitar 1,5 Å. Pada ionisasi +1, ikatan C–C berfluktuasi di kisaran 1,5–2,3 Å namun tidak mengalami pemutusan, menunjukkan bahwa pelepasan satu elektron belum cukup untuk merusak ikatan C–C. Pada ionisasi +2, pemutusan

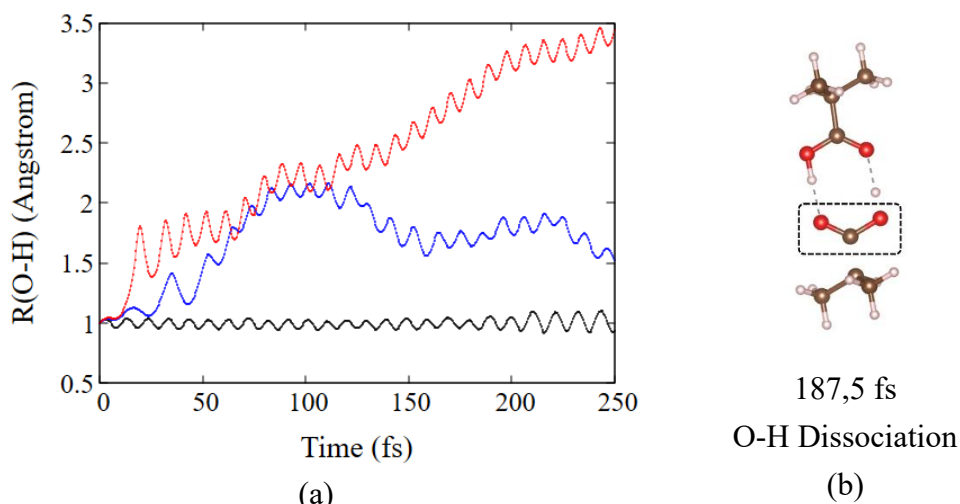
ikatan C–C terjadi lebih awal yaitu pada 34 fs, lebih cepat dibandingkan monomer yang putus pada 39,5 fs, dengan panjang ikatan terus meningkat hingga mencapai 5,3 Å. Sementara itu, untuk mengetahui perubahan ikatan C–C pada tingkat ionisasi yang lebih tinggi, hasil simulasi pada kondisi ionisasi +4 ditunjukkan pada Gambar berikut.



Gambar 4.9 Grafik Perubahan panjang ikatan C–C pada dimer Acrylic Acid interface dalam keadaan terionisasi +4, di mana warna hitam menunjukkan ikatan C2–C4 dan warna merah menunjukkan ikatan C5–C6. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan C–C pada ionisasi +4 pada waktu 63,5 fs.

Berdasarkan Gambar 4.9 menunjukkan bahwa pada ionisasi +4, kedua ikatan C–C yang diamati yaitu C2–C4 dan C5–C6 seluruhnya mengalami pemutusan pada sekitar 63,5 fs dengan panjang ikatan meningkat hingga 5,7 Å. Berbeda dengan ionisasi +2 yang hanya menunjukkan pemutusan pada satu ikatan C–C, pada ionisasi +4 pemutusan terjadi pada lebih dari satu ikatan sekaligus.

Selain ikatan C–C, perubahan ikatan O–H pada dimer juga diamati untuk memperoleh gambaran yang lebih lengkap mengenai pengaruh ionisasi terhadap struktur molekul.



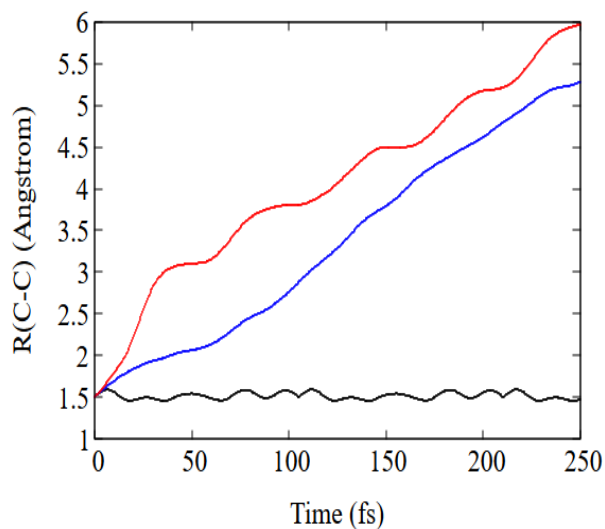
Gambar 4.10 Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada dimer Acrylic Acid interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. (b) visualisasi disosiasi ikatan O–H pada ionisasi +2 pada waktu 187,5 fs.

Berdasarkan Grafik pada Gambar 4.10, menunjukkan bahwa pada kondisi netral, panjang ikatan O–H stabil di sekitar 1,0 Å. Pada ionisasi +1, panjang ikatan meningkat bertahap hingga 1,5–2,0 Å tanpa terjadi pemutusan. Pada ionisasi +2, pemutusan ikatan O–H terjadi dengan panjang ikatan meningkat hingga 3,4 Å, berbeda dengan monomer yang tidak mengalami pemutusan O–H sama sekali. Hal ini menunjukkan bahwa interaksi antarrantai pada dimer turut berkontribusi terhadap pemutusan ikatan O–H. Berdasarkan hasil simulasi yang telah diperoleh, waktu disosiasi ikatan pada model dimer untuk setiap kondisi ionisasi dirangkum dalam Tabel berikut.

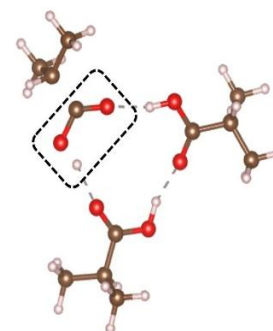
Tabel 4.3 Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada Dimer Acrylic Acid Interface dalam keadaan netral dan bermuatan.

Ionisasi	Waktu disosiasi O-H (fs)	Waktu disosiasi C-C (fs)
Netral	-	-
+1	-	-
+2	187,5	34
+4	-	63,5

Berdasarkan Tabel 4.3 menunjukkan bahwa pada kondisi netral dan ionisasi +1 tidak terjadi pemutusan ikatan. Pada ionisasi +2, ikatan C–C mengalami pemutusan lebih dahulu pada 34 fs, kemudian diikuti oleh pemutusan ikatan O–H pada 187,5 fs. Sementara itu, pada ionisasi +4, ikatan C–C putus pada 63,5 fs, sedangkan ikatan O–H tetap stabil hingga akhir simulasi. Hasil ini menunjukkan bahwa ikatan C–C pada model dimer lebih mudah mengalami pemutusan akibat ionisasi dibandingkan ikatan O–H. Berbeda dengan model monomer, pada model dimer teramati pemutusan ikatan O–H pada kondisi ionisasi +2, yang menunjukkan bahwa penambahan rantai molekul memengaruhi respons model terhadap ionisasi. Setelah menganalisis model dimer, penelitian dilanjutkan pada model trimer acrylic acid *interface* untuk mengetahui pengaruh penambahan jumlah rantai terhadap pemutusan ikatan akibat ionisasi.



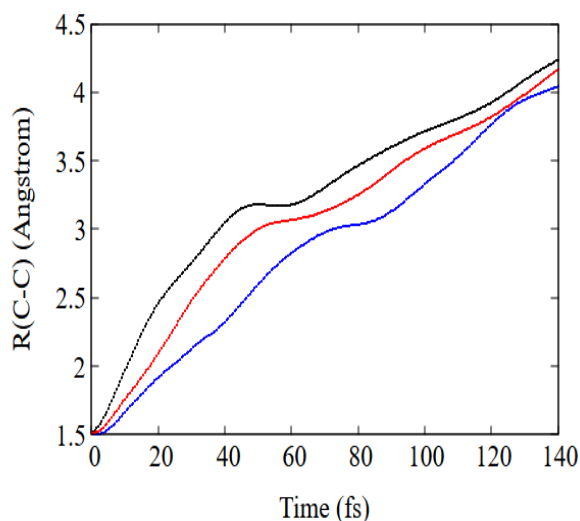
(a)

111 fs dan 37 fs
C-C Dissociation

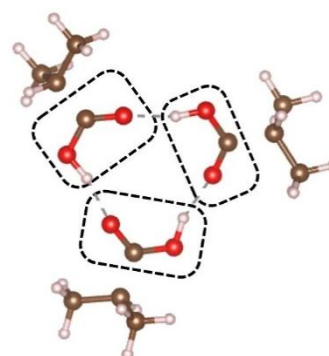
(b)

Gambar 4.11 Grafik perubahan panjang ikatan C-C pada trimer Acrylic Acid interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. (b) visualisasi disosiasi ikatan C-C pada ionisasi +1 pada waktu 111 fs dan pada ionisasi +2 pada waktu 37 fs. Menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.

Berdasarkan Gambar 4.11 menunjukkan bahwa pada kondisi netral, panjang ikatan C–C stabil di sekitar 1,5 Å. Pada ionisasi +1, panjang ikatan C–C meningkat secara bertahap hingga mencapai 5,3 Å, yang menandakan terjadinya pemutusan ikatan pada tingkat ionisasi yang lebih rendah dibandingkan monomer dan dimer. Pada ionisasi +2, pemutusan ikatan terjadi lebih cepat dengan waktu disosiasi 37 fs dan panjang ikatan meningkat hingga 5,7 Å. Untuk mengetahui perubahan ikatan C–C pada tingkat ionisasi yang lebih tinggi, hasil simulasi pada kondisi ionisasi +6 ditunjukkan pada Gambar berikut.



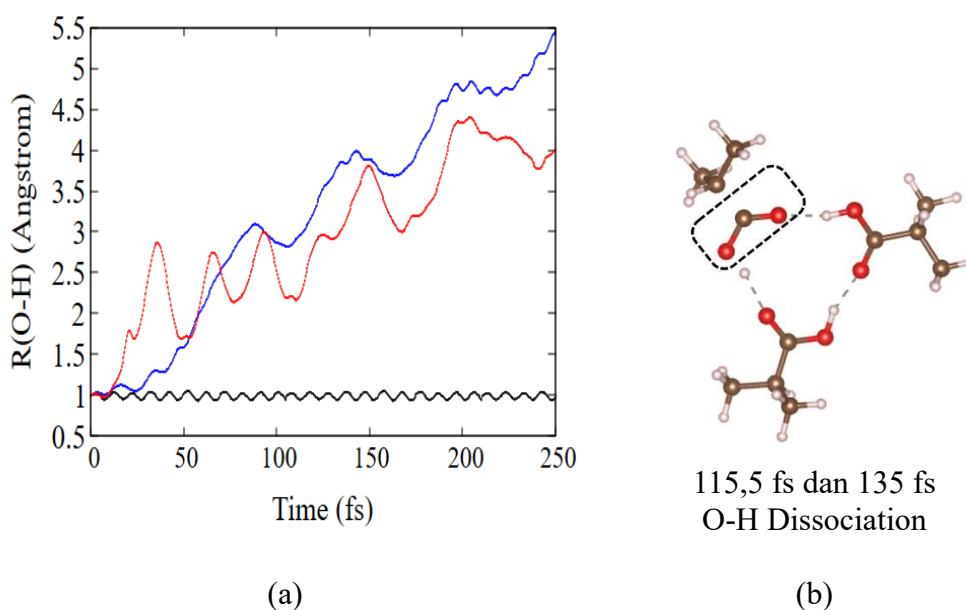
(a)

50,5 fs
C-C Dissociation

(b)

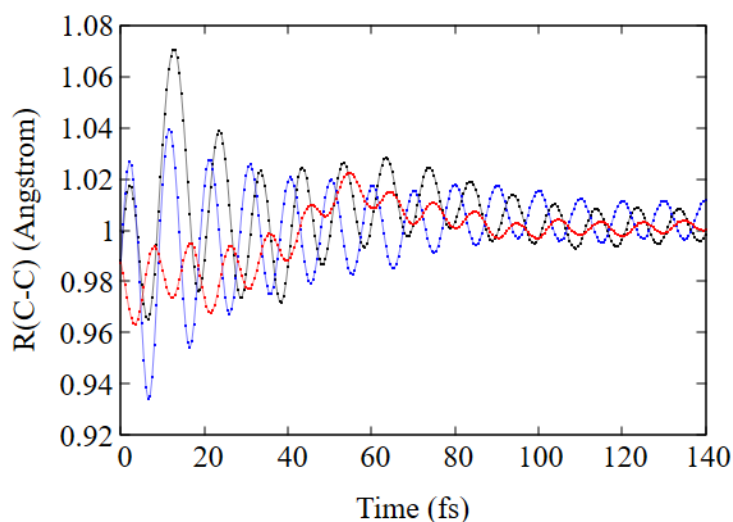
Gambar 4.12 Grafik Perubahan panjang ikatan C–C pada trimer Acrylic Acid dalam keadaan terionisasi +6, di mana warna hitam menunjukkan ikatan C2–C4, warna biru menunjukkan ikatan C9–C10 dan warna merah menunjukkan ikatan C5–C6. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan C–C pada ionisasi +6 pada waktu 50,5 fs.

Berdasarkan Gambar 4.12 menunjukkan bahwa pada ionisasi +6, ketiga ikatan C–C yang diamati yaitu C2–C4, C9–C10, dan C5–C6 seluruhnya mengalami pemutusan selama simulasi berlangsung pada 50,5 fs dengan panjang ikatan meningkat hingga 6,0 Å. Selain ikatan C–C, perubahan ikatan O–H pada trimer juga perlu diamati untuk mendapatkan gambaran yang lebih menyeluruh.



Gambar 4.13 Grafik perubahan panjang ikatan O-H pada trimer Acrylic Acid interface dalam berbagai keadaan ionisasi, di mana warna hitam menunjukkan keadaan netral, warna biru menunjukkan keadaan terionisasi +1, dan warna merah menunjukkan keadaan terionisasi +2. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0. (b) visualisasi disosiasi ikatan O-H pada ionisasi +1 pada waktu 115 fs dan pada ionisasi +2 pada waktu 135 fs.

Berdasarkan grafik pada Gambar 4.13 menunjukkan bahwa pada kondisi netral, panjang ikatan O–H stabil di sekitar 1,0 Å. Pada ionisasi +1, panjang ikatan O–H meningkat bertahap hingga mencapai 5,4 Å, sedangkan pada ionisasi +2, pemutusan terjadi lebih cepat dengan panjang ikatan meningkat hingga 3,8 Å. Berbeda dengan monomer yang tidak mengalami pemutusan O–H sama sekali, trimer justru menunjukkan pemutusan O–H bahkan pada ionisasi +1, yang mengindikasikan bahwa kompleksitas interaksi antarrantai mempercepat pemutusan ikatan O–H. Untuk melihat perubahan ikatan O–H pada kondisi ionisasi +6, hasil simulasi ditampilkan pada Gambar berikut.



Gambar 4.14 Grafik Perubahan panjang ikatan O-H pada trimer Acrylic Acid dalam keadaan terionisasi +6, di mana warna hitam menunjukkan ikatan O2-H1, warna biru menunjukkan ikatan O3-H9 dan warna merah menunjukkan ikatan O6-H17. Perhitungan dilakukan menggunakan simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat CAM-B3LYP/6-311++G** melalui perangkat lunak ORCA 6.0.

Berdasarkan Gambar 4.14 menunjukkan bahwa pada ionisasi +6, ketiga ikatan O-H yang diamati yaitu O2-H1, O3-H9, dan O6-H17 seluruhnya menunjukkan fluktuasi panjang ikatan yang stabil di kisaran 0,94–1,08 Å sepanjang simulasi hingga 140 fs, tanpa terjadi pemutusan. Hal ini mengindikasikan bahwa pada tingkat ionisasi yang sangat tinggi, perubahan distribusi elektron lebih terkonsentrasi pada rantai utama sehingga ikatan O-H menjadi relatif lebih terlindungi dari proses disosiasi. Hasil selengkapnya mengenai waktu disosiasi pada trimer dirangkum dalam tabel berikut.

Tabel 4.4 Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C-C dan O-H pada trimer Acrylic Acid *interface* dalam keadaan netral dan bermuatan.

Ionisasi	Waktu disosiasi O-H (fs)	Waktu disosiasi C-C (fs)
Netral	-	-
+1	115,5	111
+2	135,5	37
+6	-	50,5

Berdasarkan Tabel 4.4 menunjukkan bahwa pada kondisi netral tidak teramati pemutusan ikatan. Berbeda dengan monomer dan dimer yang tidak mengalami pemutusan ikatan pada ionisasi +1, trimer justru mengalami pemutusan ikatan C–C dan O–H hampir bersamaan dengan waktu disosiasi masing-masing 111 fs dan 115,5 fs. Pada ionisasi +2, ikatan C–C lebih dahulu putus pada 37 fs diikuti ikatan O–H pada 135,5 fs. Pada ionisasi +6, hanya ikatan C–C yang mengalami pemutusan pada 50,5 fs, sedangkan ikatan O–H tetap stabil karena muatan lebih terlokalisasi pada rantai utama.

Secara keseluruhan, hasil simulasi AIMD pada ketiga model menunjukkan pola yang konsisten bahwa ikatan C–C selalu lebih rentan terhadap ionisasi dibandingkan ikatan O–H, dan semakin kompleks sistem serta semakin tinggi tingkat ionisasi, semakin cepat pemutusan ikatan terjadi. Temuan ini mengonfirmasi bahwa mekanisme radiolisis pada acrylic acid interface berlangsung melalui pemutusan ikatan C–C pada gugus karboksil sebagai langkah pertama, diikuti oleh pemutusan ikatan O–H yang menghasilkan produk degradasi berupa CO₂, sebagaimana yang telah diilustrasikan pada Gambar 4.5.

4.2. Pembahasan

4.2.1 Struktur Geometri Acrylic Acid Interface

Kestabilan model acrylic acid *interface* pada kondisi netral menjadi factor penting agar polimer ini dapat berfungsi secara optimal sebagai material dalam DDS. Kestabilan tersebut dipengaruhi oleh Panjang ikatan dan kekuatan ikatan antar atom penyusunnya, khususnya ikatan C–C pada rantai utama dan ikatan O–H pada gugus karboksil (–COOH). Secara teoritis, ikatan C–C tunggal memiliki panjang referensi sebesar 1,52 Å, sedangkan ikatan O–H pada gugus karboksil

berada pada kisaran 0,97 Å. Perbedaan nilai panjang ikatan dari nilai referensi tersebut menunjukkan adanya pengaruh interaksi antarmolekul, seperti ikatan hidrogen, yang dapat memengaruhi distribusi elektron sehingga menyebabkan terjadinya pemanjangan maupun pemendekan ikatan (Zhang et al., 2019).

Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa nilai panjang ikatan C–C pada seluruh model, baik monomer, dimer, maupun trimer acrylic acid *interface*, berada pada kisaran 1,50–1,51 Å. Nilai tersebut sangat mendekati nilai teoritis ikatan C–C tunggal sebesar 1,52 Å, yang menunjukkan bahwa rantai utama polimer acrylic acid berada dalam kondisi stabil dan sesuai dengan karakteristik polimer berbasis asam akrilat pada kondisi netral (Zhang et al., 2019). Berbeda dengan ikatan C–C, panjang ikatan O–H pada gugus karboksil (–COOH) menunjukkan adanya variasi antara monomer dan struktur *interface*. Pada monomer acrylic acid, panjang ikatan O–H sebesar 0,96 Å mendekati nilai referensi teoritis 0,97 Å, yang menggambarkan kondisi ikatan O–H dalam keadaan bebas tanpa pengaruh interaksi antarmolekul. Oleh karena itu, nilai panjang ikatan O–H pada monomer dijadikan sebagai acuan untuk membandingkan perubahan yang terjadi pada struktur dimer dan trimer acrylic acid *interface*.

Pemanjangan ikatan O–H sebesar 0,02–0,03 Å pada dimer dan trimer dibandingkan monomer mengindikasikan terbentuknya interaksi ikatan hidrogen antargugus karboksil (–COOH) di daerah *interface*. Interaksi tersebut menyebabkan distribusi elektron pada ikatan O–H tertarik ke arah akseptor ikatan hidrogen, sehingga ikatan O–H menjadi lebih lemah dan jarak antara atom O dan H meningkat. Hal ini didukung oleh penelitian sebelumnya yang menunjukkan bahwa

interaksi hidrogen berperan dalam mempertahankan kestabilan struktur pada acrylic acid *interface* (Bay et al., 2025).

Peningkatan jumlah rantai polimer dari monomer ke dimer hingga trimer menyebabkan struktur yang terbentuk menjadi semakin kompleks. Pada monomer, interaksi yang terjadi bersifat intramolekul dan relatif sederhana. Pada dimer, dua rantai yang saling berdekatan membentuk interaksi ikatan hidrogen antargugus karboksil di daerah interface. Pada trimer, kehadiran tiga rantai menghasilkan jaringan ikatan hidrogen yang lebih beragam dan kompleks. Semakin kompleks jaringan ikatan hidrogen yang terbentuk, efek stabilisasi antarrantai yang dihasilkan semakin besar, sebagaimana ditunjukkan oleh Arkaban et al. (2022) bahwa gugus karboksil memiliki peran penting dalam memengaruhi kestabilan struktur dan karakter elektronik sistem berbasis asam akrilat.

Secara keseluruhan, ketiga model acrylic acid interface berada dalam kondisi stabil pada kondisi netral dengan ikatan C–C yang sesuai nilai teoritis dan ikatan O–H yang dipengaruhi oleh ikatan hidrogen di daerah interface. Kestabilan struktur pada kondisi netral ini menjadi titik awal untuk memahami bagaimana acrylic acid interface merespons perubahan ketika mengalami ionisasi akibat paparan radiasi gamma, yang selanjutnya dianalisis melalui distribusi kerapatan elektron pada subbab berikutnya.

4.2.2 Distribusi Kerapatan Elektron pada acrylic acid *Interface*

Kestabilan struktur yang telah diidentifikasi pada kondisi netral akan mengalami gangguan ketika acrylic acid interface terpapar radiasi gamma yang memicu proses ionisasi. Ionisasi menyebabkan pelepasan elektron dari sistem molekul, yang berdampak langsung pada perubahan distribusi kerapatan elektron.

Secara teoritis, gugus karboksil ($-\text{COOH}$) yang memiliki elektronegativitas tinggi akan menjadi bagian pertama yang merespons pelepasan elektron tersebut, karena pada kondisi netral kerapatan elektron cenderung terkonsentrasi di sekitar atom oksigen. Semakin tinggi tingkat ionisasi, redistribusi elektron akan semakin meluas dari gugus karboksil menuju rantai utama polimer, yang berpotensi menurunkan kestabilan struktur acrylic acid interface secara keseluruhan.

Hasil analisis distribusi kerapatan elektron dalam penelitian ini menunjukkan bahwa pola distribusi kerapatan elektron pada tingkat ionisasi awal cenderung terlokalisasi di sekitar gugus karboksil ($-\text{COOH}$) pada seluruh model molekul, sebelum akhirnya menyebar ke rantai utama polimer pada tingkat ionisasi yang lebih tinggi. Pola tersebut sejalan dengan penelitian Hill et al. (1992) yang menyatakan bahwa gugus karboksil merupakan bagian yang paling awal mengalami perubahan distribusi kerapatan elektron ketika molekul kehilangan elektron akibat proses ionisasi. Tingginya sensitivitas gugus karboksil terhadap ionisasi berkaitan dengan elektronegativitas atom oksigen yang tinggi sehingga pada kondisi netral kerapatan elektron cenderung terkonsentrasi di daerah tersebut. Akibatnya, ketika terjadi pelepasan elektron menyebabkan gugus karboksil menjadi bagian yang paling rentan dan paling awal mengalami redistribusi elektron. Hasil ini juga didukung oleh Arkaban et al., 2022 yang menyatakan bahwa gugus karboksil pada acrylic acid memiliki fleksibilitas elektronik yang tinggi, namun rentan mengalami perubahan akibat ionisasi.

Meskipun pola umum perubahan distribusi kerapatan elektron pada ketiga model menunjukkan kesamaan, terdapat perbedaan yang signifikan dalam hal kompleksitas dan luas penyebaran redistribusi elektron. Pada monomer acrylic acid,

perubahan distribusi kerapatan elektron pada kondisi ionisasi +1 dan +2 masih terpusat di sekitar ikatan O–H dan C–C pada gugus karboksil. Kondisi tersebut menunjukkan bahwa struktur rantai utama polimer masih berada dalam keadaan relatif stabil.

Seiring bertambahnya jumlah rantai yang berinteraksi, pola redistribusi elektron menjadi semakin kompleks. Pada sistem dimer, interaksi ikatan hidrogen antarrantai di daerah interface yang telah terbentuk pada kondisi netral menyebabkan redistribusi elektron tidak hanya terlokalisasi pada gugus karboksil, tetapi mulai meluas ke daerah interaksi antarrantai pada ionisasi +2, dan telah menyebar ke rantai utama pada ionisasi +4. Pola penyebaran yang lebih luas dibandingkan monomer ini menunjukkan bahwa kehadiran dua rantai yang berinteraksi meningkatkan sensitivitas struktur terhadap ionisasi (Matusiak et al., 2021). Hal ini memiliki implikasi penting bagi DDS, karena struktur *interface* yang lebih kompleks berpotensi lebih rentan mengalami degradasi pada tingkat ionisasi yang lebih rendah.

Sementara itu, Pola yang sama juga terlihat pada sistem trimer, namun perubahan yang terjadi lebih besar dibandingkan pada sistem dimer. Pada ionisasi +2, redistribusi elektron pada trimer telah meluas ke rantai utama polimer, lebih cepat dibandingkan monomer maupun dimer pada tingkat ionisasi yang sama. Pada ionisasi +6, perubahan distribusi elektron telah menyebar hampir ke seluruh struktur trimer, mengindikasikan penurunan kestabilan elektronik yang signifikan. Hasil ini sejalan dengan Azevedo et al. (2025) yang menyatakan bahwa struktur dengan jumlah rantai lebih banyak memiliki kerentanan lebih tinggi terhadap gangguan ionisasi, serta Singh et al. (2022) yang menyatakan bahwa radiasi

berenergi tinggi dapat memicu pembentukan radikal bebas dan pemutusan ikatan secara bertahap seiring meningkatnya ionisasi.

Secara keseluruhan, perbandingan ketiga model menunjukkan pola yang konsisten bahwa gugus karboksil selalu menjadi titik awal redistribusi elektron, dan semakin kompleks sistem serta semakin tinggi tingkat ionisasi, semakin luas gangguan distribusi elektron yang terjadi. Pola redistribusi elektron yang semakin meluas ini pada akhirnya memicu terjadinya pemutusan ikatan kimia pada acrylic acid interface, yang merupakan inti dari mekanisme radiolisis yang dibahas pada subbab berikutnya.

4.2.3 Mekanisme Radiolisis Gugus Karboksil pada Acrylic Acid Interface

Pola redistribusi elektron yang telah teramati pada gugus karboksil dan kemudian menyebar ke rantai utama polimer sebagaimana dibahas pada subbab sebelumnya menunjukkan adanya gangguan elektronik akibat ionisasi. Gangguan ini selanjutnya memicu terjadinya pemutusan ikatan kimia melalui mekanisme radiolisis. Pada penelitian ini, radiolisis berlangsung melalui mekanisme chain scission, yaitu pemutusan rantai polimer akibat pelemahan ikatan setelah kehilangan elektron. Hasil simulasi menunjukkan bahwa ikatan C–C lebih rentan mengalami pemutusan dibandingkan ikatan O–H. Hal ini sejalan dengan energi disosiasi ikatan C–C yang lebih rendah dibandingkan ikatan O–H, sehingga ikatan C–C lebih mudah terpengaruh oleh gangguan elektronik akibat ionisasi. (Ashfaq et al., 2021). Oleh karena itu, analisis pemutusan ikatan C–C dan O–H digunakan untuk menjelaskan mekanisme radiolisis yang terjadi pada acrylic acid *interface*.

Berdasarkan hasil simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD), peningkatan tingkat ionisasi secara konsisten menurunkan kestabilan struktur pada

seluruh model Acrylic Acid *interface* yang dianalisis. Pada seluruh model struktur molekul, ikatan C–C pada rantai utama terbukti lebih rentan mengalami pemutusan dibandingkan ikatan O–H pada gugus karboksil. Ikatan C–C pada rantai utama memiliki energi disosiasi yang relatif lebih rendah dibandingkan ikatan O–H, sehingga lebih rentan mengalami pelemahan ketika struktur mengalami gangguan elektronik akibat ionisasi. Proses ionisasi menyebabkan pelepasan elektron dari sistem yang berdampak pada penurunan kerapatan elektron pada orbital pengikat. Kondisi ini mengakibatkan penurunan kekuatan ikatan secara bertahap, yang pada akhirnya memicu peningkatan panjang ikatan C–C selama simulasi AIMD hingga terjadi disosiasi. Sebaliknya, ikatan O–H menunjukkan fluktuasi panjang ikatan yang relatif kecil tanpa indikasi pemutusan, yang menunjukkan bahwa ikatan tersebut lebih stabil terhadap perubahan distribusi elektron pada tingkat ionisasi yang sama (Ashfaq et al., 2021).

Pada sistem monomer, hasil simulasi AIMD menunjukkan bahwa struktur masih stabil pada kondisi netral dan ionisasi +1 karena tidak teramati pemutusan ikatan selama simulasi berlangsung. Pemutusan ikatan C–C baru terjadi pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 39,5 fs, sedangkan ikatan O–H tetap stabil pada seluruh tingkat ionisasi yang diuji. Kondisi ini menunjukkan bahwa pada sistem monomer terdapat ambang batas ionisasi tertentu sebelum degradasi struktural terjadi, yang konsisten dengan pola redistribusi elektron pada monomer yang menunjukkan gangguan masih terlokalisasi di gugus karboksil. Dari perspektif DDS, kestabilan monomer pada ionisasi rendah mengindikasikan bahwa unit dasar acrylic acid masih memiliki ketahanan yang memadai terhadap paparan radiasi dosis rendah sehingga berpotensi mempertahankan kemampuannya dalam

mengkapsulasi dan melepaskan obat secara terkontrol. Hasil ini sejalan dengan Hill et al. (1992) yang menyatakan bahwa gugus karboksil cenderung mempertahankan kestabilannya pada kondisi ionisasi rendah.

Berbeda dengan monomer, sistem dimer menunjukkan pola pemutusan ikatan yang lebih beragam, konsisten dengan pola redistribusi elektron yang lebih luas pada dimer sebagaimana telah dibahas sebelumnya. Pemutusan ikatan C–C terjadi lebih awal pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 34 fs, lebih cepat dibandingkan monomer yang putus pada 39,5 fs. Selain itu, pemutusan ikatan O–H juga mulai teramati pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 187,5 fs, sesuatu yang tidak dijumpai pada monomer. Hal ini menunjukkan bahwa interaksi antarrantai pada dimer yang sebelumnya berperan menstabilkan struktur melalui ikatan hidrogen, justru memperluas dampak ionisasi tidak hanya pada ikatan C–C tetapi juga pada ikatan O–H. Pada ionisasi +4, pemutusan ikatan C–C terjadi pada 63,5 fs, lebih lambat dibandingkan ionisasi +2. Kondisi ini terjadi karena pelepasan elektron dalam jumlah besar menyebabkan ketidakstabilan tidak hanya berfokus pada satu ikatan, tetapi menyebar ke seluruh rantai karbon pada dimer acrylic acid *interface*. Hal ini menunjukkan bahwa pada tingkat ionisasi tinggi, perubahan distribusi elektron lebih banyak memengaruhi rantai utama AA dibandingkan gugus hidroksil (O–H), sehingga ikatan O–H tetap relatif stabil selama simulasi berlangsung (Azevedo et al., 2025).

Trimer Acrylic Acid *interface* menunjukkan tingkat kerentanan terhadap ionisasi yang paling tinggi dibandingkan monomer dan dimer Acrylic Acid *interface*. Kerentanan ini disebabkan oleh adanya interaksi tiga rantai polimer pada daerah *interface* yang membuat redistribusi elektron akibat ionisasi menyebar lebih

luas ke seluruh struktur. Jaringan ikatan hidrogen yang lebih kompleks pada sistem trimer menyebabkan kestabilan struktur menurun secara signifikan, terbukti dari pemutusan ikatan C–C dan O–H yang terjadi hampir bersamaan sejak ionisasi +1 dengan waktu disosiasi masing-masing 111 fs dan 115,5 fs. Pada ionisasi +6, hanya ikatan C–C yang mengalami pemutusan pada 50,5 fs, sementara ikatan O–H tetap tidak terputus, mengindikasikan bahwa pada tingkat ionisasi yang sangat tinggi distribusi elektron lebih terkonsentrasi pada rantai utama sehingga gugus O–H menjadi relatif lebih terlindungi dari proses disosiasi.

Secara keseluruhan, perbandingan antara monomer, dimer, dan trimer acrylic acid interface menunjukkan tiga temuan utama yang saling berkaitan. Pertama, ikatan C–C merupakan ikatan yang paling rentan terhadap ionisasi dibandingkan ikatan O–H pada seluruh model yang dianalisis. Kedua, semakin kompleks struktur interface, semakin rendah tingkat ionisasi yang diperlukan untuk memicu pemutusan ikatan. Hal ini ditunjukkan oleh ikatan O–H yang tidak mengalami pemutusan pada monomer, mulai terputus pada dimer pada kondisi ionisasi +2, dan telah terputus sejak ionisasi +1 pada trimer. Ketiga, mekanisme radiolisis pada acrylic acid interface diawali oleh pemutusan ikatan C–C pada gugus karboksil, yang kemudian diikuti oleh pemutusan ikatan O–H sehingga menghasilkan produk degradasi berupa CO₂. Temuan ini sejalan dengan pernyataan Ashfaq et al. (2021) bahwa paparan radiasi pada acrylic acid dapat memicu degradasi rantai polimer melalui mekanisme *chain scission*. Selain itu, hasil penelitian ini memberikan bukti pada tingkat atomistik bahwa kompleksitas interaksi antarrantai pada daerah interface berperan penting dalam meningkatkan kerentanan struktur terhadap ionisasi.

Pemahaman mengenai mekanisme radiolisis pada acrylic acid *interface* yang diperoleh dalam penelitian ini memberikan gambaran yang lebih jelas mengenai respons struktur acrylic acid terhadap ionisasi akibat paparan radiasi gamma. Hasil penelitian menunjukkan bahwa proses radiolisis diawali oleh redistribusi elektron pada gugus karboksil, yang kemudian diikuti oleh pemutusan ikatan C–C dan O–H. Selain itu, peningkatan kompleksitas struktur *interface* menyebabkan ikatan menjadi lebih rentan mengalami pemutusan pada tingkat ionisasi yang lebih rendah. Temuan ini memberikan informasi pada tingkat atomistik mengenai faktor-faktor yang memengaruhi kestabilan struktur acrylic acid ketika terpapar radiasi.

Dalam konteks pengembangan *drug delivery system* (DDS), kestabilan struktur polimer merupakan aspek penting karena berhubungan dengan kemampuan material untuk mempertahankan integritasnya selama proses penyimpanan, sterilisasi, maupun penggunaan. Pemutusan ikatan yang terjadi akibat radiolisis dapat menyebabkan degradasi rantai polimer dan perubahan sifat material, sehingga berpotensi memengaruhi kinerja sistem penghantaran obat. Oleh karena itu, pemahaman mengenai lokasi ikatan yang paling rentan terhadap ionisasi serta pengaruh interaksi antarrantai terhadap proses degradasi dapat menjadi dasar ilmiah dalam merancang material berbasis acrylic acid yang lebih tahan terhadap paparan radiasi. Dengan demikian, hasil penelitian ini tidak hanya menjelaskan mekanisme radiolisis pada tingkat atomistik, tetapi juga memberikan informasi yang mendukung pengembangan DDS berbasis acrylic acid yang lebih stabil dan efektif.

4.2.4 Perbandingan dengan Penelitian Sebelumnya

Penelitian ini memiliki keterkaitan dengan beberapa penelitian sebelumnya yang membahas mekanisme radiolisis dan degradasi polimer berbasis asam akrilat, namun juga menunjukkan beberapa perbedaan dalam aspek pendekatan dan kajian yang dilakukan. Penelitian Hill et al. 1992 secara eksperimental menunjukkan bahwa proses radiolisis pada acrylic acid menghasilkan produk degradasi berupa CO dan CO₂ melalui mekanisme dekarboksilasi akibat paparan radiasi, serta menunjukkan bahwa gugus karboksil merupakan bagian yang paling rentan terhadap degradasi akibat ionisasi. Hasil penelitian ini secara atomistik mendukung temuan tersebut, di mana pemutusan ikatan C–C yang teramati pada seluruh struktur acrylic acid interface mengindikasikan terlepasnya gugus karboksil dari rantai utama polimer yang secara mekanistik sesuai dengan pembentukan CO₂, sedangkan pemutusan ikatan O–H pada sistem dimer dan trimer diduga berkaitan dengan kemungkinan pembentukan CO. Perbedaan mendasar antara penelitian ini dengan Hill et al. 1992 terletak pada pendekatannya. Hill et al. 1992 menggunakan pendekatan eksperimental yang berfokus pada identifikasi produk akhir radiolisis tanpa memberikan gambaran atomistik mengenai proses pemutusan ikatan secara langsung. Sebaliknya, penelitian ini menggunakan simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) berbasis Density Functional Theory (DFT) yang mampu mengamati secara langsung kapan, di mana, dan seberapa cepat pemutusan ikatan C–C maupun O–H terjadi pada berbagai tingkat ionisasi, sehingga memberikan pemahaman mekanistik yang lebih mendalam.

Kesesuaian juga ditemukan dengan hasil Azevedo et al. 2025 yang menyatakan bahwa paparan radiasi gamma pada polimer dapat memicu mekanisme

chain scission dan degradasi struktur akibat ionisasi secara umum. Dalam penelitian ini, mekanisme chain scission tersebut ditunjukkan secara atomistik melalui pemutusan ikatan C–C dan O–H pada acrylic acid interface selama simulasi AIMD. Namun, penelitian Azevedo et al. 2025 tidak membahas secara spesifik bagaimana kompleksitas interaksi antarrantai pada daerah interface memengaruhi kerentanan struktur terhadap ionisasi. Penelitian ini melengkapi keterbatasan tersebut dengan menunjukkan bahwa semakin kompleks jaringan ikatan hidrogen antarrantai pada sistem dimer dan trimer, semakin mudah struktur mengalami pemutusan ikatan pada tingkat ionisasi yang lebih rendah, di mana pada monomer pemutusan ikatan C–C baru terjadi pada ionisasi +2, sedangkan pada trimer sudah terjadi sejak ionisasi +1.

Arkaban et al. 2022 menyatakan bahwa gugus karboksil pada acrylic acid memiliki fleksibilitas elektronik yang tinggi namun rentan terhadap perubahan akibat ionisasi, serta berperan penting dalam memengaruhi kestabilan struktur dan karakter elektronik sistem berbasis asam akrilat. Pernyataan tersebut sejalan dengan hasil penelitian ini yang menunjukkan bahwa redistribusi kerapatan elektron akibat ionisasi selalu diawali dari gugus karboksil sebelum menyebar ke rantai utama polimer pada seluruh model yang dianalisis. Penelitian ini memperluas temuan Arkaban et al. 2022 dengan membuktikan secara dinamis melalui simulasi AIMD bahwa kerentanan gugus karboksil tidak bersifat statis, melainkan semakin meningkat seiring bertambahnya jumlah rantai polimer yang berinteraksi pada daerah *interface*.

Secara keseluruhan, penelitian ini memberikan kontribusi baru yang belum dibahas secara spesifik oleh penelitian-penelitian sebelumnya, yaitu kajian

atomistik mengenai hubungan antara kompleksitas struktur interface, redistribusi kerapatan elektron, dan mekanisme pemutusan ikatan C–C maupun O–H akibat ionisasi pada model monomer, dimer, dan trimer acrylic acid *interface* menggunakan simulasi AIMD berbasis DFT. Pendekatan ini tidak hanya mengonfirmasi mekanisme radiolisis yang telah dilaporkan secara eksperimental oleh Hill et al. 1992, tetapi juga memberikan gambaran dinamis mengenai urutan dan kecepatan degradasi struktural yang terjadi pada tingkat atomistik, yang memiliki implikasi penting dalam pengembangan sistem penghantaran obat berbasis acrylic acid yang lebih tahan terhadap paparan radiasi gamma.

4.2.5 Kajian Keislaman

Radiasi dan berbagai fenomena fisika di alam semesta merupakan bagian dari sunnatullah yang Allah SWT ciptakan dengan hukum dan keteraturan tertentu. Salah satu pemanfaatannya dalam bidang kesehatan adalah pengembangan *drug delivery system* (DDS) berbasis radiasi gamma, yang bertujuan meningkatkan efektivitas terapi sekaligus meminimalkan kerusakan jaringan tubuh. Penelitian mengenai mekanisme radiolisis pada *acrylic acid interface* akibat radiasi gamma bertujuan untuk memahami interaksi radiasi terhadap material polimer guna mengembangkan sistem penghantaran obat yang lebih aman dan efektif (Ashfaq et al., 2021). Dalam perspektif Islam, penelitian ini merupakan bentuk pemanfaatan akal manusia untuk mengkaji tanda-tanda kebesaran Allah SWT melalui fenomena alam yang terjadi di alam semesta. Kesadaran akan pentingnya penggunaan akal dan pengkajian terhadap fenomena alam dijelaskan dalam Q.S. Ali 'Imran (3): 190–191:

إِنَّ فِي خَلْقِ السَّمُوتِ وَالْأَرْضِ وَاخْتِلَافِ اللَّيْلِ وَالنَّهَارِ لَآيَاتٍ لِّأُولِي الْأَلْبَابِ ﴿١٩٠﴾
الَّذِينَ يَذْكُرُونَ اللَّهَ قِيَامًا وَقُعُودًا وَعَلَىٰ جُنُوبِهِمْ وَيَتَفَكَّرُونَ فِي خَلْقِ السَّمُوتِ وَالْأَرْضِ
رَبَّنَا مَا خَلَقْتَ هَذَا بَاطِلًا سُبْحَنَكَ فَقِنَا عَذَابَ النَّارِ ﴿١٩١﴾

Artinya: "Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi, dan pergantian malam dan siang terdapat tanda-tanda bagi orang-orang yang berakal, yaitu orang-orang yang mengingat Allah sambil berdiri, duduk, atau dalam keadaan berbaring, dan mereka memikirkan tentang penciptaan langit dan bumi seraya berkata: 'Ya Tuhan kami, tidaklah Engkau menciptakan semua ini sia-sia. Maha Suci Engkau, maka peliharalah kami dari siksa neraka.'"

Q.S. Ali 'Imran (3): 190–191 menjelaskan bahwa manusia diperintahkan untuk memperhatikan, merenungkan, dan mempelajari berbagai fenomena alam sebagai tanda kekuasaan Allah SWT. Orang yang berakal (*ulul albab*) bukan hanya mengingat Allah melalui ibadah ritual, tetapi juga menggunakan akalnya untuk memahami keteraturan ciptaan-Nya. Fenomena alam termasuk interaksi energi, atom, molekul, dan radiasi diciptakan Allah dengan hukum-hukum tertentu yang dapat dipelajari melalui ilmu pengetahuan dan penelitian ilmiah (Ramadhan Syah Nasution, 2025).

Buya Hamka menjelaskan bahwa Q.S. Ali 'Imran (3): 190–191 ini mendorong manusia untuk menyeimbangkan zikir dan pikir. Kemajuan ilmu pengetahuan dan teknologi lahir dari kemampuan manusia menggunakan akal yang telah dianugerahkan Allah SWT (HAMKA, 2017). Oleh karena itu, penelitian ilmiah yang bertujuan menghasilkan kemaslahatan bagi manusia merupakan bagian dari pengamalan nilai-nilai Islam. Penggunaan metode simulasi seperti *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) dan *Density Functional Theory* (DFT) dalam penelitian ini mencerminkan pemanfaatan akal manusia untuk memahami mekanisme pemutusan ikatan akibat radiolisis secara lebih mendalam (Azevedo et al., 2025).

Konsep keseimbangan dan keteraturan yang tercermin dalam fenomena radiolisis tersebut juga menjadi salah satu dasar penting yang ditetapkan Allah SWT dalam penciptaan alam semesta. Sebagaimana dijelaskan dalam Q.S. ar-rahman (55):7-9:

أَلَا تَطْعَمُونَ فِي الْمِيزَانِ ﴿٨﴾ وَأَقِيمُوا الْوَزْنَ بِالْقِسْطِ وَلَا تُخْسِرُوا الْمِيزَانَ ﴿٩﴾ وَالْأَرْضَ وَضَعَهَا لِلْأَنَامِ ﴿١٠﴾

Artinya: “Langit telah Dia tinggikan dan Dia telah menciptakan timbangan (keadilan dan keseimbangan) (7) Agar kamu tidak melampaui batas dalam timbangan itu (8) egakkanlah timbangan itu dengan adil dan janganlah kamu mengurangi timbangan itu. (9)”

Quraish Shihab dalam Tafsir Al-Mishbah menjelaskan bahwa *al-mizan* tidak hanya bermakna timbangan fisik, melainkan mencakup seluruh sistem keseimbangan dan keteraturan yang Allah tetapkan dalam alam semesta (Shihab, 2001). Dalam konteks penelitian ini, prinsip tersebut tercermin dalam mekanisme radiolisis, dimana energi radiasi gamma menyebabkan pemutusan dan pembentukan ikatan kimia secara terukur pada material mengikuti hukum-hukum alam yang telah ditetapkan Allah SWT. Prinsip untuk tidak melampaui batas dalam *al-mizan* juga relevan dengan pemanfaatan radiasi di bidang medis, di mana dosis radiasi harus dikontrol secara tepat agar tidak merusak jaringan sehat menjadi salah satu landasan etis pengembangan *drug delivery system* berbasis radiasi (Xie et al., 2023).

Dari perspektif hukum Islam, penelitian mengenai radiolisis dan pemanfaatan radiasi gamma untuk pengembangan teknologi kesehatan pada dasarnya diperbolehkan, selama bertujuan memberikan manfaat dan tidak menimbulkan mudarat yang lebih besar. Hal ini sesuai dengan kaidah fikih *أَلَا ضَلَّ فِي*

أَلَا ضَلَّ فِي yang berarti "hukum asal segala sesuatu adalah mubah hingga terdapat

dalil yang melarangnya." Prinsip ini diperkuat oleh kaidah lain dalam Islam, yaitu *لَا ضَرَرَ وَلَا ضِرَارَ* yang berarti "tidak boleh membahayakan diri sendiri maupun orang lain." Kedua kaidah ini secara bersama-sama menjadi landasan etis penelitian ini, bahwa pemanfaatan radiasi gamma diperbolehkan selama dilakukan secara terukur dan terkontrol, dan penelitian mengenai mekanisme radiolisis justru bertujuan memahami sekaligus meminimalkan dampak negatif radiasi terhadap jaringan biologis. Dengan demikian, penggunaan simulasi komputasi dan teknologi radiasi dalam penelitian ini termasuk bentuk pemanfaatan sunnatullah demi kemaslahatan manusia, khususnya dalam bidang pengobatan dan kesehatan.

Dengan demikian, penelitian mengenai mekanisme radiolisis pada *acrylic acid interface* akibat radiasi gamma tidak hanya berkontribusi secara ilmiah dalam bidang fisika dan kesehatan, tetapi juga memperkuat kesadaran akan keteraturan ciptaan Allah SWT yang dapat dipelajari dan dimanfaatkan oleh manusia. Oleh karena itu, penelitian ini dapat dipandang sebagai wujud nyata dari semangat *uhul albab*, yakni mengintegrasikan penggunaan akal, pengembangan ilmu pengetahuan, dan kesadaran terhadap kebesaran Allah SWT demi kemaslahatan kehidupan manusia.

BAB V

PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan mengenai mekanisme radiolisis pada acrylic acid (AA) *interface* akibat ionisasi menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT), dapat disimpulkan bahwa:

1. Model geometri acrylic acid (AA) *interface* yang paling stabil berhasil diperoleh melalui optimasi geometri menggunakan fungsional CAM-B3LYP dengan koreksi dispersi DFT-D4. Panjang ikatan C–C pada seluruh model berada pada kisaran 1,50–1,51 Å dan mendekati nilai referensi teoritis, sedangkan panjang ikatan O–H mengalami perubahan seiring bertambahnya jumlah rantai, yang menunjukkan terbentuknya interaksi ikatan hidrogen pada daerah *interface*.
2. Perubahan kerapatan elektron akibat ionisasi pertama kali terjadi pada gugus karboksil (–COOH), terutama pada ikatan C–C dan O–H. Seiring meningkatnya tingkat ionisasi, redistribusi elektron menjadi semakin luas dan penyebarannya semakin cepat pada model dengan jumlah rantai yang lebih banyak, menunjukkan bahwa kompleksitas model meningkatkan sensitivitas terhadap ionisasi.
3. Mekanisme radiolisis pada acrylic acid *interface* berlangsung melalui mekanisme *chain scission* yang diawali oleh pemutusan ikatan C–C pada rantai utama polimer. Pemutusan ikatan terjadi pada tingkat ionisasi yang lebih rendah seiring meningkatnya kompleksitas struktur, di mana monomer dan

dimer mulai mengalami pemutusan ikatan pada ionisasi +2, sedangkan trimer telah mengalami pemutusan ikatan sejak ionisasi +1.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, penelitian selanjutnya disarankan untuk menambahkan pengaruh medium seperti air, agar mekanisme radiolisis yang diamati lebih merepresentasikan kondisi nyata penggunaan material berbasis *Drug Delivery System* (DDS). Selain itu, penelitian selanjutnya juga disarankan untuk mengkaji mekanisme radiolisis pada lebih dari satu rantai atau molekul secara bersamaan. Kajian tersebut diharapkan dapat memberikan pemahaman yang lebih komprehensif mengenai proses degradasi struktur dan stabilitas material berbasis AA akibat paparan radiasi gamma.

DAFTAR PUSTAKA

- Alfianto, E. (2015). Implementasi Metode Teori Fungsional Kerapatan Pada Bahasa C Untuk Menghitung Energi Keadaan Dasar Berbagai Atom. *Elektronik Jurnal Arus Elektro Indonesia (EJAEI)* , 1(3), 1–6.
- Arkaban, H., Barani, M., Akbarizadeh, M. R., Chauhan, N. P. S., Jadoun, S., Soltani, M. D. &, & Zarrintaj, P. (2022). Polyacrylic acid is a polymer with high permeability due to the carboxylic acid group's greater flexibility. In *Mdpi* (Vol. 14, Issue 1259). <https://www.mdpi.com/2073-4360/14/6/1259/htm>
- Ashfaq, A., An, J. C., Ulański, P., & Al-Sheikhly, M. (2021). On the mechanism and kinetics of synthesizing polymer nanogels by ionizing radiation-induced intramolecular crosslinking of macromolecules. *Pharmaceutics*, 13(11). <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics13111765>
- Azevedo, A. M. de, da Silveira, P. H. P. M., Lopes, T. J., da Costa, O. L. B., Monteiro, S. N., Veiga-Júnior, V. F., Silveira, P. C. R., Cardoso, D. D., & Figueiredo, A. B. H. da S. (2025). Ionizing Radiation and Its Effects on Thermoplastic Polymers: An Overview. *Polymers*, 17(8), 1–36. <https://doi.org/10.3390/polym17081110>
- Barkah, D. C., Ahmad, F., Susilo Putri, D. I., Ratna Ningsih, S. N., & Yuniarsih, N. (2023). Nanopartikel Sebagai Sistem Penghantaran Obat Tertarget Melalui Injeksi. *Jurnal Bidang Ilmu Kesehatan*, 13(3), 288–295. <https://doi.org/10.52643/jbik.v13i3.2678>
- Bashori, A., Nurhasanah, I., Fisika, D., Sains, F., & Diponegoro, U. (2016). *SENSITIVITAS LARUTAN NANOPARTIKEL CeO₂ TERHADAP RADIASI SINAR GAMMA TELETHERAPI COBALT-60*. 5(4), 141–148.
- Bay, M. Van, Thi, P., Linh, T., Le, T., Tram, B., Hoa, N. T., Mechler, A., & Vo, Q. V. (2025). RSC Advances Computational study of the kinetics and mechanism of radical polymerization of acrylic acid and derivatives in organic solvents. *RSC Advances*, 16, 8289–8299. <https://doi.org/10.1039/D5RA09849A>
- Bothe, E., & Hildenbrand, K. (1995). *Radiolysis of poly(acrylic acid) in aqueous solution*. 46(4), 909–912.
- Capelle, K. (2006). A bird's-eye view of density-functional theory. *Brazilian Journal of Physics*, 36(4 A), 1318–1341. <https://doi.org/10.1590/s0103-97332006000700035>
- Chen, Q., Yang, Z., Liu, H., Man, J., Oladejo, A. O., Ibrahim, S., Wang, S., & Hao, B. (2024). Novel Drug Delivery Systems: An Important Direction for Drug Innovation Research and Development. *Pharmaceutics*, 16(5). <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics16050674>
- Chen, W., Shi, K., Yu, Y., Yang, P., Bei, Z., Mo, D., Yuan, L., Pan, M., Chen, Y.,

- & Qian, Z. (2024). Drug delivery systems for colorectal cancer chemotherapy. *Chinese Chemical Letters*, 35(2), 109159. <https://doi.org/10.1016/j.cclet.2023.109159>
- Cota, S. S., Vasconcelos, V., Senne, M., Carvalho, L. L., Rezende, D. B., & Correa, R. F. (2007). Changes in mechanical properties due to gamma irradiation of high-density polyethylene (HDPE). *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 24(2), 259–265. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322007000200010>
- Ezike, T. C., Okpala, U. S., Onoja, U. L., Nwike, C. P., Ezeako, E. C., Okpara, O. J., Okoroafor, C. C., Eze, S. C., Kalu, O. L., Odoh, E. C., Nwadike, U. G., Ogbodo, J. O., Umeh, B. U., Ossai, E. C., & Nwanguma, B. C. (2023). Advances in drug delivery systems, challenges and future directions. *Heliyon*, 9(6), e17488. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e17488>
- Friedman, R., Boye, K., & Flatmark, K. (2013). Molecular modelling and simulations in cancer research. *Biochimica et Biophysica Acta - Reviews on Cancer*, 1836(1), 1–14. <https://doi.org/10.1016/j.bbcan.2013.02.001>
- Grotendorst, J. (2000). *Modern methods and algorithms of quantum chemistry*.
- Gumilar, R., Nur Fitriani, A., Ummutafiqoh, T., Subkhi, M. N., & Perkasa, Y. S. (2016). Studi Pengukuran Koefisien Atenuasi Material Zincalume Sebagai Perisai Radiasi Gamma. *Wahana Fisika*, 1(1), 21. <https://doi.org/10.17509/wafi.v1i1.4528>
- HAMKA. (2017). *Pustaka Nasional Pte Ltd Singapura*. [https://ia902800.us.archive.org/12/items/tafsiralazhar08_201912/Tafsir Al-Azhar 02.pdf](https://ia902800.us.archive.org/12/items/tafsiralazhar08_201912/Tafsir%20Al-Azhar%2002.pdf)
- Hill, D. J. T., O'Donnell, J. H., Pomery, P. J., & Winzor, C. L. (1992). Gamma radiolysis of poly(acrylic acid) and poly(methacrylic acid). *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part, B*, 39(3), 237–241. [https://doi.org/10.1016/1359-0197\(92\)90147-8](https://doi.org/10.1016/1359-0197(92)90147-8)
- Iftimie, R., Minary, P., & Tuckerman, M. E. (2005). Ab initio molecular dynamics: Concepts, recent developments, and future trends. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 102(19), 6654–6659. <https://doi.org/10.1073/pnas.0500193102>
- Ito, T., Yamaguchi, S., Soga, D., Yoshimoto, T., & Koyama, Y. (2022). Preparation of a Bioadhesive Poly(Acrylic Acid)/Polyvinylpyrrolidone Complex Gel and Its Clinical Effect on Dental Hemostasis. *Gels*, 8(8). <https://doi.org/10.3390/gels8080462>
- Izot, A. U. R., Favi, M. O. S. T. A., & Ni, B. (n.d.). *FROM BASICS TO A PRACTICAL MATERIAL FROM BASICS TO A PRACTICAL MATERIAL*.

- Katsir, A.-H. I. (1923). *Tafsir Al-Quran Al-'Azim/Tafsir Ibn Katsir*. <https://archive.org/details/tafsir-ibn-katsir>
- Kausar, A. (2021). Poly(acrylic acid) nanocomposites: Design of advanced materials. *Journal of Plastic Film and Sheeting*, 37(4), 409–428. <https://doi.org/10.1177/8756087920981615>
- Khakim, A. (2019). *Konsep perhitungan laju radiolisis dengan code mcnp*. 181–186.
- Martien, R., Adhyatmika, Irianto, I. D. K., Farida, V., & Sari, D. P. (2012). Technology Developments Nanoparticles as Drug. *Majalah Farmaseutik*, 8(1), 133–144. <https://jurnal.ugm.ac.id/majalahfarmaseutik/article/view/24067/15747>
- Matusiak, M., Kadłubowski, S., & Ulański, P. (2021). Recombination of poly(Acrylic acid) radicals in acidic aqueous solutions: A pulse radiolysis study. *Applied Sciences (Switzerland)*, 11(21). <https://doi.org/10.3390/app112110142>
- Naikwadi, A. T., Sharma, B. K., Bhatt, K. D., & Mahanwar, P. A. (2022). Gamma Radiation Processed Polymeric Materials for High Performance Applications: A Review. *Frontiers in Chemistry*, 10(March), 1–15. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.837111>
- Pacheco, C., Baião, A., Ding, T., Cui, W., & Sarmiento, B. (2023). Recent advances in long-acting drug delivery systems for anticancer drug. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 194, 114724. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2023.114724>
- Paquet, E., & Viktor, H. L. (2018). Computational Methods for Ab Initio Molecular Dynamics. *Advances in Chemistry*, 2018, 1–14. <https://doi.org/10.1155/2018/9839641>
- Ramadhan Syah Nasution. (2025). Konsep Penciptaan Alam Semesta Dalam Al-Qur'an dan Sains. *Akhlak: Jurnal Pendidikan Agama Islam Dan Filsafat*, 2(2), 115–125. <https://doi.org/10.61132/akhlak.v2i2.634>
- Rick, Steven W, A Stuart, S. J. (2002). Potentials and algorithms for incorporating polarizability in computer simulations. *Reviews in Computational Chemistry*, 18(Wiley Online Library), 89–146.
- Rina, G., Pusat, S., Reaktor, T., & Nuklir, K. (2012). *Mekanisme Reaksi Asam Borat Dengan Produk Radiolisis Akibat Radiasi Sinar- γ Pada Temperatur 25 O C*. 74–84.
- Sahara, A. A. (2023). *Pengaruh Iradiasi Sinar Gamma (Γ) Pada Membran Berbasis Selulosa Asetat Alma Aulia Sahara Program Studi Kimia 2023 M / 1444 H Pengaruh Iradiasi Sinar Gamma (Γ) Pada*.
- Shihab, M. Q. (2001). *Tafsir Al-Mishbah Jilid 02 -Dr. M. Quraish Shihab*.

- Shihab, M. Q. (2002). *TAFSIR AL-MISBAH: Pesan, Kesan dan Keserasssian Al-Qur'an* (Vol. 10). Lentera Hati. [https://ia601806.us.archive.org/13/items/tafsir-al-mishbah-prof-dr.-m.-quraish-shihab-/Tafsir Al-Mishbah Jilid 10 -Dr. M. Quraish Shihab-pages-deleted.pdf](https://ia601806.us.archive.org/13/items/tafsir-al-mishbah-prof-dr.-m.-quraish-shihab-/Tafsir%20Al-Mishbah%20Jilid%2010%20-Dr.%20M.%20Quraish%20Shihab-pages-deleted.pdf)
- Sofia Rahmi, N. D. H. (n.d.). *SISTEM PENGHANTARAN OBAT BARU (NEW DRUG DELIVERY SYSTEM)*.
- Suprayoga, E., Hasdeo, E. H., & Hanna, M. Y. (2021). *Odul raktis*.
- W. Kohn, A. D. Becke, and R. G. P. (1996). Density Functional Theory of Electronic Structure W. *Nursing Standard (Royal College of Nursing (Great Britain) :* 1987), 100, 12974–12980. <https://doi.org/10.7748/ns2003.08.17.47.38.c3434>
- Wella, S. A., Suprayoga, E., Nugraha, A. R. T., Hasdeo, E. H., Ukhtary, M. S., & Hanna, M. Y. (2021). *Modul Praktis Research Starter Kit untuk Riset Teori dan Komputasi Material*. Pusat Penelitian Fisika Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia.
- Wennmohs, F., Becker, U., & Riplinger, C. (2024). *The ORCA quantum chemistry program package. June 2021*. <https://doi.org/10.1063/5.0004608>
- Wróbel, P., Kubisiak, P., & Eilmes, A. (2024). Ab Initio Molecular Dynamics Simulations of Aqueous LiTFSI Solutions—Structure, Hydrogen Bonding, and IR Spectra. *Journal of Physical Chemistry B*, 128(4), 1001–1011. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c06633>
- Xie, Y., Liu, M., Cai, C., Ye, C., Guo, T., Yang, K., Xiao, H., Tang, X., & Liu, H. (2023). Recent progress of hydrogel-based local drug delivery systems for postoperative radiotherapy. *Frontiers in Oncology*, 13(February), 1–11. <https://doi.org/10.3389/fonc.2023.1027254>
- Yakin, K. (2024). *First-Principles Study on Proton Transfer in Triazole Molecules [Tesis Disertasi]* (Issue September). Kanazawa University.
- Yakin, K., Yamaguchi, N., Nakajima, T., Mizuno, M., & Ishii, F. (2024). First-Principles study on proton transfer in triazole molecules. *Chemical Physics Letters*, 856(September). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2024.141582>
- Yang, R., Xia, C., Mei, C., & Li, J. (2025). Integration of biopolymers in polyacrylic acid hydrogels: Innovations and applications in bioresources and bioproducts. *Journal of Bioresources and Bioproducts*, 10(2), 145–169. <https://doi.org/10.1016/j.jobab.2024.12.005>
- Yopianto, D., Sipangkar, M. J., Budiyanto, R., & Siahaan, P. (2016). Studi Interaksi antara Segmen Dimer Kitosan dengan Peptida Ac-CA-NH₂ dan Ac-TP-NH₂ secara Komputasi Ab-Initio. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 19(3), 118–125. <https://doi.org/10.14710/jksa.19.3.118-125>

- Yun, Y. H., Lee, B. K., & Park, K. (2015). Controlled Drug Delivery: Historical perspective for the next generation. *Journal of Controlled Release*, 219, 2–7. <https://doi.org/10.1016/j.jconrel.2015.10.005>
- Zhang, Y., Xu, Z., Zhao, Y., & Zhang, X. (2019). *Ab initio Molecular Dynamics Simulation Study of Dissociation Electron Attachment to Lactic Acid and Isomer*. 1–11. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-56019-4>

LAMPIRAN

Lampiran 1. Input data penelitian

1. Input optimasi geometri

```

file Edit Search View Program Option Help
[Icons: File, Edit, Search, View, Program, Option, Help, Print, Copy, Paste, Undo, Redo, Find, Replace, Run, Save, Open, Close, Quit]

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** NormalSCF
6
7 %geom
8     MaxIter 300
9 end
10
11 %scf
12     MaxIter 300
13 end
14
15 %maxcore 3000
16 !nofrozencore
17
18 %pal
19 nprocs 2
20 end
21
22 * xyz 0 1
23 C      -1.40307      2.15775     -0.03161
24 C      -1.59516      0.72178      0.41348
25 C      -2.96282      0.20889     -0.03448
26 C      -0.49422     -0.18717     -0.12794
27 O      -2.26827      2.92659     -0.41645
28 O      -0.13536      2.59214      0.10724
29 H       0.48612      0.10054      0.26683
30 H      -0.43827     -0.13524     -1.22087
31 H      -0.67073     -1.22948      0.15793
32 H      -3.76762      0.82752      0.37753
33 H      -3.05675      0.22889     -1.12614
34 H      -3.12550     -0.81978      0.30384
35 H      -1.56346      0.71651      1.50956
36 H      -0.17576      3.52882     -0.17891
37 *
38
39

```

2. Input perubahan kerapatan elektron

```

File Edit Search View Program Option Help
[Icons: File Explorer, Print, etc.]

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** NormalSCF
6
7 %geom
8   MaxIter 300
9 constraints
10 [C 0 C]
11 [C 1 C]
12 [C 2 C]
13 [C 3 C]
14 [C 4 C]
15 [C 5 C]
16 [C 6 C]
17 [C 7 C]
18 [C 8 C]
19 [C 9 C]
20 [C 10 C]
21 [C 11 C]
22 [C 12 C]
23 [C 13 C]
24 end
25 end
26
27 %scf
28   MaxIter 300
29 end
30
31 %maxcore 3000
32 !nofrosencore
33
34 %pal
35 nprocs 2
36 end
37
38 * xyz 2 1
39 C      -1.37401714873890    2.12899323794808    -0.10029398243977
40 C      -1.59148176849758    0.71506936682043    0.38230380977905
41 C      -2.98832918099201    0.22649619177361    0.02525396914293
42 C      -0.49794124631714    -0.19021242096338    -0.20048190421720
43 O      -2.03927591343342    2.71153173227896    -0.91339411532953
44 O      -0.29454888615244    2.69764780427771    0.47859649884691
45 H       0.49754815556062    0.15506722712406    0.07916184716796
46 H      -0.56228793791391    -0.21777291272289    -1.29094706876730

```

3. Input AIMD

```

File Edit Search View Program Option Help
[Icons: File Explorer, Print, etc.]

1 ! MD CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** freq NormalSCF
2
3 %md
4 Timestep 0.5_fs # This is a comment
5 Initvel 300_K
6 Thermostat NHC 300_K Timecon 10.0_fs
7 Dump Position Stride 1 Filename "Zahro.xyz"
8 Restart IfExists
9 Run 1000
10 end
11
12 %geom
13     MaxIter 300
14 end
15
16 %scf
17     MaxIter 300
18 end
19
20 %maxcore 5000
21
22 %pal
23 nprocs 20
24 end
25
26 * xyz 2 1
27 C      -1.37431352444447      2.12910489340043      -0.10053065536815
28 C      -1.59146928462930      0.71506494560170      0.38205645750121
29 C      -2.98840943520607      0.22648301781582      0.02509782208959
30 C      -0.49790344881126      -0.19035719389709      -0.20053170911935
31 O      -2.03938454274434      2.71203266915011      -0.91331887014518
32 O      -0.29471619159477      2.69729675131908      0.47889391402414
33 H      0.49760466643138      0.15579283957647      0.07816947282958
34 H      -0.56286036026602      -0.21908077718481      -1.29091238757180
35 H      -0.62391947876466      -1.20884519349739      0.17024919125248
36 H      -3.75860456149649      0.86825417989454      0.45471474327911
37 H      -3.13046354938750      0.21937872819915      -1.05654295333045
38 H      -3.13638563958450      -0.78779446713299      0.40061864081346
39 H      -1.46947360937133      0.73677936522241      1.46904705325780
40 H      -0.20057104013066      3.58355024153256      0.10299928048747
41 *

```



JURNAL BIMBINGAN SKRIPSI/TESIS/DISERTASI

IDENTITAS MAHASISWA

NIM : 220604110054
Nama : ZAHROTUL WATHONIYAH
Fakultas : SAINS DAN TEKNOLOGI
Jurusan : FISIKA
Dosen Pembimbing 1 : Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si
Dosen Pembimbing 2 : Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA
Judul Skripsi/Tesis/Disertasi : MEKANISME RADIKALISASI PADA ACRYLIC ACID INTERFACE AKIBAT RADIASI GAMMA PADA DRUG DELIVERY SYSTEM

No	Tangga Bimbingan	Nama Pembimbing	Deskripsi Proses Bimbingan	Tahun Akademik	Status
1	09 Oktober 2025	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan Proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
2	27 November 2025	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan Proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
3	12 Desember 2025	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan Proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
4	18 Desember 2025	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan Proposal dan tanda tangan seminar proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
5	26 Februari 2026	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Revisi Seminar Proposal	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
6	23 April 2026	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
7	28 April 2026	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
8	18 Mei 2026	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
9	20 Mei 2026	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
10	25 Mei 2026	Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA	Bimbingan integrasi BAB 4	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
11	26 Mei 2026	Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA	Revisi integrasi BAB 4	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi
12	03 Juni 2026	Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Revisi dan tanda tangan skripsi	Genap 2026/2027	Sudah Dikoreksi

Telah disetujui
Untuk mengajukan ujian Skripsi/Tesis/Disertasi

Dosen Pembimbing 2

Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA



FARID SAMSU HANANTO, M.T

Malang,
Dosen Pembimbing 1

Prof. Dr. Drs. MOKHAMMAD TIRONO, M.Si