

**MEKANISME RADIOLISIS ACRYLIC ACID AKIBAT RADIASI GAMMA
SEBAGAI APLIKASI *DRUG DELIVERY SYSTEM***

SKRIPSI

Oleh:

ANISA HAYATUN NUFUS RAHMAN

NIM. 220604110052



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

**MEKANISME RADIOLISIS ACRYLIC ACID AKIBAT RADIASI GAMMA
SEBAGAI APLIKASI *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:
ANISA HAYATUN NUFUS RAHMAN
NIM. 220604110052**

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

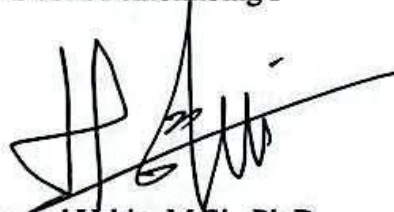
HALAMAN PERSETUJUAN
MEKANISME RADIOLISIS ACRYLIC ACID AKIBAT RADIASI GAMMA
SEBAGAI APLIKASI *DRUG DELIVERY SYSTEM*

SKRIPSI

Oleh:
ANISA HAYATUN NUFUS RAHMAN
NIM. 220604110052

Telah Diperiksa dan Disetujui untuk Diuji
Pada tanggal, 04 Juni 2026

Dosen Pembimbing I



Khusnul Yakin, M.Si., Ph.D.
NIP. 19910103 201903 1 009

Dosen Pembimbing II



Dr. Umaiyatus Syarifah, M.A.
NIP. 19820925 200901 2 005

Mengetahui,
Ketua Program Studi



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

HALAMAN PENGESAHAN

MEKANISME RADIOLISIS ACRYLIC ACID AKIBAT RADIASI GAMMA SEBAGAI APLIKASI *DRUG DELIVERY SYSTEM*

SKRIPSI

Oleh:

ANISA HAYATUN NUFUS RAHMAN
NIM. 220604110052

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

Penguji Utama	<u>Prof. Dr. Drs. H. Mokhammad Tirono, M.Si.</u> NIP. 19641211 199111 1 001	
Ketua Penguji	<u>Dr. Erna Hastuti, M.Si.</u> NIP. 19811119 200801 2 00	
Sekretaris Penguji	<u>Khusnul Yakin, M.Si., Ph.D.</u> NIP. 19910103 201903 1 009	
Anggota Penguji	<u>Dr. Umaiyatus 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 di bawah ini:

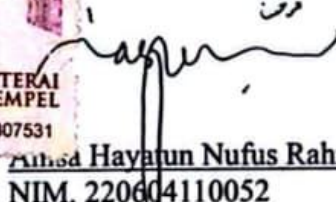
Nama : Anisa Hayatun Nufus Rahman
NIM : 220604110052
Program Studi : Fisika
Fakultas : Sains dan Teknologi
Judul Penelitian : Mekanisme Radiolisis Acrylic Acid Akibat Radiasi
Gamma Sebagai Aplikasi *Drug Delivery System*

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

Malang, 16 Juni 2026

Yang Membuat Pernyataan




Anisa Hayatun Nufus Rahman
NIM. 220604110052

MOTTO

“Aku membahayakan nyawa ibu untuk lahir ke dunia, jadi tidak mungkin aku tidak ada artinya. Dan aku membuat ayah bekerja tiap hari hingga lelah, jadi aku pastikan lelahnya tidak sia-sia.”

(Penulis)

“Loving yourself is hard, that’s why are here to help you love yourself.”

HALAMAN PERSEMBAHAN

Segala puji dan syukur hanya milik Allah *Subhanahu wa Ta'ala*, yang telah memberikan rahmat, hidayah, serta kekuatan, sehingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik. Sholawat serta salam senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad *Sallahu 'Alaihi Wasallam*, yang telah menjadi teladan hidup bagi umat manusia. Skripsi ini penulis persembahkan dengan penuh rasa hormat dan terima kasih kepada:

1. Allah SWT yang Maha Pengasih lagi Maha Penyayang, segala proses ini hanya mungkin terjadi karena kasih dan kehendak-Mu. Dalam tiap sesak napas dan doa lirih, dalam gelap malam yang sepi dan langkah yang nyaris menyerah, engkau tidak pernah meninggalkanku.
2. Kedua orang tua ku tersayang, Aba Rahman dan Ummi Mismah. Terima kasih penulis ucapkan atas segala pengorbanan dan ketulusan yang diberikan hingga saat ini. Terimakasih sudah selalu senantiasa memberikan yang terbaik untuk anak-anak nya, tak kenal lelah mendoakan, mengusahakan, memberikan support penuh baik secara moral maupun finansial, serta memprioritaskan Pendidikan dan kebahagiaan anak-anak nya. Semoga melalui skripsi ini, Aba dan Ummi dapat tersenyum lebih bangga, sebab segala doa, peluh, dan kasih yang selama ini dipanjatkan akhirnya mengantarkan putri kecilnya berada pada titik ini, menyandang gelar sarjana sebagaimana yang selama ini diharapkan dan diimpikan. Besar harapan penulis semoga Aba dan Ummi selalu sehat, berkah umur, dan bisa menyaksikan keberhasilan lainnya yang akan diraih penulis di masa yang akan datang.

3. Saudara penulis, Aa' Fahrurrozi Rahman, S.E., M.M., beserta Mbak Eriah Putri yang sudah penulis anggap seperti kakak kandung sendiri, dan Adek Fakhri Ali Rahman beserta seluruh keluarga besar terima kasih atas segala perhatian, dukungan, serta kasih yang selalu diberikan dengan tulus.
4. Terakhir, terima kasih sebesar-besarnya kepada diri sendiri, *the girl who almost gave up, but chose to stay*, **Anisa Hayatun Nufus Rahman**, yang tidak kenal lelah untuk terus belajar dan mencoba. Terima kasih karena sudah terus berjuang, *even when everything felt so exhausting. Sometimes, the world doesn't go the way you want. You've been through ups and downs on your own, and sometimes you don't even know how to ask for help. But you keep remembering your purpose and find a way to stand up again. All the wounds you quietly heal are a form of love, from God, and from yourself. Thank you for facing your problems calmly and for having the courage to make difficult decisions. I'm so proud of you, Nas. No one knows you better than yourself. Thank you for being a good friend to yourself, and for being a kind person who keeps learning*, Anisa. Tulisan ini menjadi bukti proses panjang yang dijalani dengan penuh tanggung jawab dan ketekunan. Semoga tulisan ini dapat bermanfaat dan menjadi langkah awal penulis untuk terus berproses dan menjadi orang baik di masa depan bagi masyarakat luas.

KATA PENGANTAR

Segala puji syukur bagi Allah SWT atas limpahan kasih sayang, rahmat, taufiq, dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Mekanisme Radiolisis Acrylic Acid Akibat Radiasi Gamma Sebagai Aplikasi *Drug Delivery System*” sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana pada program studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

Dalam proses penyusunan skripsi ini, penulis mendapatkan banyak bantuan, bimbingan, serta dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, dengan segala kerendahan hati, penulis sampaikan terima kasih kepada:

1. Kedua orang tua ku tersayang, Aba dan Ummi. Terima kasih penulis ucapkan atas segala pengorbanan dan ketulusan yang diberikan hingga saat ini.
2. Prof. Dr. Hj. Ilfi Nur Diana, M.Si., selaku rektor Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
3. Dr. H. Agus Mulyono, S.Pd., M.Kes., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
4. Farid Samsu Hananto S.Si., M.T., selaku Ketua Program Studi Fisika Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
5. Khusnul Yakin, M.Si., Ph.D., sebagai dosen pembimbing yang senantiasa memberikan ilmu pengetahuan, inovasi dan meluangkan waktunya untuk membimbing penulis selama proses penyusunan skripsi.
6. Dr. Umaiyyatus Syarifah, MA., sebagai dosen pembimbing kedua yang senantiasa memberikan arahan, memberikan ilmu pengetahuan, dan membimbing penulis hingga skripsi ini berjalan dengan lancar dan baik.

7. Prof. Dr. Drs. H. Mokhammad Tirono, M.Si., dan Dr. Erna Hastuti, M.Si., selaku dewan penguji skripsi.
8. Seluruh Dosen dan Staf Akademik Program Studi Fisika Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
9. Jajaran dewan pengasuh Pusat Ma'had Al-Jami'ah, yang selalu memiliki tempat istimewa dalam relung hati penulis di masa perkuliahan beserta keluarga besar Ma'had Sunan Ampel Al-Aly yang telah menjadi rumah kedua bagi penulis dalam berproses dan mengembangkan potensi diri. Semoga Allah senantiasa memberi taufiq dan hidayah-Nya pada setiap derap langkah pengabdian.
10. Pengasuh, pendidik, dan segenap keluarga besar Pondok Pesantren Darul Qur'an wa Tsaqafah yang telah menghadirkan hari-hari penuh makna yang singkat nan istimewa.
11. Keluarga besar Mabna Khadijah Al-Kubra '45 dan Mabna Rabi'ah Al-Adawiyah'56 yang telah kebersamai perjalanan penulis selama mengabdikan di Pusat Ma'had Al-Jami'ah.
12. *For A.U., gracias por las oraciones, el apoyo y la disposición de acompañarme en cada etapa de este proceso hasta la culminación de esta tesis.*
13. Teman-teman seperjuangan Fisika 2022, khususnya team Research of Computational Biophysics, khususnya Shofi, Nia, Alivia, dan Fafa, terima kasih atas kebersamaan, dukungan, dan semangat yang diberikan selama proses ini.
14. Untuk mereka yang hadir sebagai teman dalam perjalanan ini, terima kasih telah berbagi waktu, cerita, dan kekuatan hingga setiap langkah terasa lebih ringan; aasexxy.

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGAJUAN	ii
HALAMAN PERSETUJUAN	iii
HALAMAN PENGESAHAN	iv
PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN	v
MOTTO	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN	vii
KATA PENGANTAR.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xv
ABSTRAK	xvi
ABSTRACT	xvii
مستخلص البحث.....	xviii
 BAB I PENDAHULUAN.....	 1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	4
1.3 Tujuan Penelitian	5
1.4 Manfaat Penelitian	5
1.5 Batasan Masalah	6
 BAB II KAJIAN PUSTAKA	 7
2.1 Acrylic Acid.....	7
2.2 Mekanisme Interaksi Radiasi Gamma dengan Materi.....	10
2.3 Mekanisme Radiolisis pada Polimer	11
2.4 Drug Delivery System (DDS).....	13
2.5 Peran Material Polimer dalam DDS	15
2.6 Density Functional Theory (DFT)	17
2.6.1 Mekanika Kuantum Banyak Partikel	18
2.6.2 Pendekatan Born-Oppenheimer	19
2.6.3 Aproksimasi Hartree-Fock.....	19
2.6.4 Teorema Hohenberg-Kohn.....	20
2.6.5 Pendekatan Kohn-Sham.....	21
2.7 Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD).....	24
 BAB III METODE PENELITIAN	 28
3.1 Jenis Penelitian	28
3.2 Waktu dan Tempat Penelitian	28
3.3 Alat dan Bahan	29
3.3.1 Perangkat Keras	29
3.3.2 Perangkat Lunak	29
3.4 Variabel Penelitian	30
3.5 Diagram Alir Penelitian	31
3.6 Prosedur Penelitian	32
3.6.1 Pembuatan Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic acid	32
3.6.2 Optimasi Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic acid.....	32

3.7	Pengambilan Data.....	35
BAB IV ANALISIS DAN PEMBAHASAN		38
4.1	Hasil Penelitian.....	38
4.1.1	Optimasi Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic Acid.....	39
4.1.2	Distribusi Kerapatan Elektron pada Jumlah Monomer Acrylic Acid (m = 1-3)	42
4.1.3	Mekanisme Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Jumlah Monomer Acrylic Acid	46
4.2	Pembahasan	58
4.2.1	Optimasi Geometri Polimer Acrylic Acid.....	58
4.2.2	Distribusi Kerapatan Elektron pada Jumlah Monomer Acrylic Acid (m = 1-3)	60
4.2.3	Mekanisme Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Jumlah Monomer Acrylic Acid	65
4.2.4	Implikasi Hasil Radiolisis terhadap Efektivitas Acrylic Acid sebagai Material <i>Drug Delivery System</i>	73
4.2.5	Analisis Perbandingan Hasil dengan Penelitian Sebelumnya.....	76
BAB V PENUTUP		82
5.1	Kesimpulan	82
5.2	Saran	83
DAFTAR PUSTAKA.....		84
LAMPIRAN.....		88

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1	Perangkat Keras	29
Tabel 3.2	Perangkat Lunak	29
Tabel 3.3	Hasil Geometri.....	35
Tabel 3.4	Distribusi kerapatan elektron pada monomer acrylic acid	35
Tabel 3.5	Distribusi kerapatan elektron pada Dimer <i>acrylic acid</i>	36
Tabel 3.6	Distribusi kerapatan elektron pada Trimer acrylic acid.....	36
Tabel 3.7	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada monomer <i>acrylic acid</i> dalam keadaan netral dan bermuatan.....	36
Tabel 3.8	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada dimer <i>acrylic acid</i> dalam keadaan netral dan bermuatan.....	36
Tabel 3.9	Waktu disosiasi ikatan untuk ikatan C–C dan O–H pada <i>trimer acrylic acid</i> dalam keadaan netral dan bermuatan.....	37
Tabel 4.1	Panjang ikatan C–C dan O–H yang diperoleh dari hasil optimasi geometri DFT pada monomer, dimer, dan trimer acrylic acid.	41
Tabel 4.2	Pola distribusi kerapatan elektron pada monomer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi yang diperoleh dari perhitungan DFT menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** dengan perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron akibat ionisasi.	43
Tabel 4.3	Pola distribusi kerapatan elektron pada dimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi yang diperoleh dari perhitungan DFT menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** dengan perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron akibat ionisasi.	44
Tabel 4.4	Pola distribusi kerapatan elektron pada trimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi yang diperoleh dari perhitungan DFT menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** dengan perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron akibat ionisasi.	45
Tabel 4.5	Waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada monomer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi berdasarkan hasil simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Tanda (–) menunjukkan bahwa ikatan tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung.....	49
Tabel 4.6	Waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada dimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi berdasarkan hasil simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA	

6.0.0. Tanda (–) menunjukkan bahwa ikatan tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung.....	52
Tabel 4.7 Waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada trimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi berdasarkan hasil simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA	
6.0.0. Tanda (–) menunjukkan bahwa ikatan tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung.....	57

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Geometri Struktur Kimia dari Acrylic acid (a) Struktur monomer Acrylic acid (b) Struktur Dimer Acrylic acid (c) Struktur Trimer Acrylic acid (Yakin, 2025).....	7
Gambar 2.2	Mekanisme Efek Radiolisis Gamma (Campbell et al, 1989).....	11
Gambar 2.3	Reaksi Utama yang Terjadi pada Radiolisis (Jeong et al., 2019).....	13
Gambar 2.4	Perhitungan Density Functional Teory (DFT) (Yakin, 2024).....	23
Gambar 3.1	Diagram Alir Penelitian	31
Gambar 4.1	Hasil optimasi geometri monomer acrylic acid menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dihitung menggunakan ORCA 6.0.0.....	40
Gambar 4.2	Hasil optimasi geometri dimer acrylic acid menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dihitung menggunakan ORCA 6.0.0.....	40
Gambar 4.3	Hasil optimasi geometri monomer acrylic acid menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dihitung menggunakan ORCA 6.0.0.....	40
Gambar 4.4	(a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada monomer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C1–C2 pada kondisi ionisasi +2 pada waktu 38,5 fs.....	47
Gambar 4.5	Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada monomer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0.....	48
Gambar 4. 6	(a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C1–C2 pada kondisi ionisasi +2.....	49
Gambar 4.7	(a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +4 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna biru mendeskripsikan ikatan C2–C6, dan warna merah mendeskripsikan ikatan C4–C7. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C4–C10 serta C4–C7 pada kondisi ionisasi +4.	51
Gambar 4.8	Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada dimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, +2, dan +4 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD)	

	menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0.	52
Gambar 4. 9	(a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada trimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C6–C10 pada kondisi ionisasi +2.	54
Gambar 4.10	(a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +6 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna hitam mendeskripsikan ikatan C4–C9, warna biru mendeskripsikan ikatan C2–C8, dan warna merah mendeskripsikan ikatan C6–C10. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C4–C10 serta C4–C7 pada kondisi ionisasi +6.	55
Gambar 4.11	Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada trimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, +2, dan +6 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0.	56

ABSTRAK

Rahman, Anisa Hayatun Nufus.2026. **Mekanisme Radiolisis Acrylic Acid Akibat Radiasi Gamma Sebagai Aplikasi *Drug Delivery System***. Skripsi. Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
Pembimbing: (1) Khusnul Yakin, M.Si., Ph.D. (2) Dr. Umayyatus Syarifah, M.A.

Kata Kunci: acrylic acid, radiasi gamma, radiolysis, DFT, AIMD, *cross-linking*, *drug delivery system*.

Acrylic acid merupakan material yang dalam bentuk polimer disebut poly acrylic acid banyak dimanfaatkan sebagai material *drug delivery system* (DDS) karena sifat bioadhesif dan kemampuannya membentuk jaringan *crosslink* akibat paparan radiasi gamma. *Cross-link* pada poly acrylic acid terjadi akibat radiolisis gugus karboksil ($-\text{COOH}$). Pemahaman mengenai mekanisme radiolisis gugus karboksil ($-\text{COOH}$) pada acrylic acid menjadi sangat penting untuk menentukan kondisi iradiasi yang optimal dalam pengembangan material DDS berbasis polimer. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis model geometri monomer, dimer, dan trimer acrylic acid yang memiliki energi paling rendah, menganalisis perubahan kerapatan elektron pada ikatan C–C dan O–H akibat ionisasi, serta mengidentifikasi mekanisme radiolisis gugus karboksil yang terjadi pada acrylic acid. Simulasi dilakukan secara komputasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dikombinasikan dengan *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) pada perangkat lunak ORCA 6.0.0, terhadap model acrylic acid dalam berbagai kondisi ionisasi. Hasil optimasi geometri menunjukkan panjang ikatan C–C sebesar 1,51 Å dan O–H sebesar 0,96 Å pada ketiga model, konsisten dengan nilai perhitungan eksperimen. Analisis distribusi elektron menunjukkan bahwa penurunan kerapatan elektron akibat ionisasi berpusat pada gugus $-\text{COOH}$ dan ikatan C–C mengalami penurunan kerapatan elektron seiring meningkatnya tingkat ionisasi, sementara ikatan O–H tidak menunjukkan penurunan yang signifikan. Hasil keseluruhan ini menunjukkan bahwa mekanisme radiolisis pada acrylic acid yaitu ketika acrylic acid dikenai radiasi gamma dan mengalami ionisasi, dan akan mengalami penurunan kerapatan elektron yang menyebabkan disosiasi ikatan C–C, tapi tidak dengan ikatan O–H, hasil ini sedikit berbeda dengan temuan mekanisme radiolisis sebelumnya, dikarenakan tidak adanya *interface* antara molekul acrylic acid dengan molekul lain dalam simulasi ini, sehingga ikatan O–H konsisten tidak mengalami pemutusan. Temuan ini mengindikasikan bahwa radiasi gamma secara selektif memutus ikatan C–C untuk membentuk *crosslink* sambil mempertahankan keutuhan gugus $-\text{COOH}$ yang bertanggung jawab terhadap sifat bioadhesif acrylic acid sebagai material DDS.

ABSTRACT

Rahman, Anisa Hayatun Nufus.2026. **The Mechanism of Acrylic Acid Radiolysis Induced by Gamma Radiation as an Application in Drug Delivery Systems.**
Thesis. Physics Program, Faculty of Science and Technology, Maulana
Malik Ibrahim State Islamic University, Malang..
Advisors: (1) Khusnul Yakin, M.Si., Ph.D. (2) Dr. Umaiyyatus Syarifah, M.A.

Keywords: acrylic acid, gamma radiation, radiolysis, DFT, AIMD, *cross-linking*, *drug delivery system*.

Acrylic acid, which in its polymeric form is known as poly(acrylic acid), is widely used as a drug delivery system (DDS) material due to its bioadhesive properties and its ability to form cross-links upon exposure to gamma radiation. Cross-linking in poly(acrylic acid) is associated with the radiolysis of the carboxyl group ($-\text{COOH}$). Therefore, understanding the mechanism of radiolysis of the carboxyl group in acrylic acid is essential for determining the optimal irradiation conditions for the development of polymer-based DDS materials. This study aims to analyze the lowest-energy geometric structures of acrylic acid monomers, dimers, and trimers, investigate changes in electron density at the C–C and O–H bonds induced by ionization, and identify the radiolysis mechanism of the carboxyl group in acrylic acid. Computational simulations were performed using Density Functional Theory (DFT) with the CAM-B3LYP/6-311++G** method combined with Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) as implemented in ORCA 6.0.0. Acrylic acid models were examined under various ionization conditions. Geometric optimization results showed C–C bond lengths of 1.51 Å and O–H bond lengths of 0.96 Å for all three models, in good agreement with experimental values. Electron density difference analysis revealed that the reduction in electron density caused by ionization is primarily localized within the $-\text{COOH}$ group. Furthermore, the C–C bond exhibited a progressive decrease in electron density with increasing ionization level, whereas the O–H bond showed no significant reduction. These findings suggest that the C–C bond is susceptible to dissociation upon ionization, while the O–H bond remains relatively stable. AIMD simulations further demonstrated that radiolysis in acrylic acid proceeds through a direct ionization pathway that initiates C–C bond cleavage (chain scission) as the first step of the radiolysis process. In contrast, the O–H bond did not undergo cleavage under any of the simulated ionization conditions. The AIMD results are consistent with the electron density analysis, confirming that ionization promotes C–C bond dissociation but does not induce O–H bond cleavage. Overall, the results indicate that when acrylic acid is exposed to gamma radiation and undergoes ionization, the resulting decrease in electron density leads to selective C–C bond dissociation while preserving the O–H bond. This radiolysis mechanism differs slightly from previous findings, as the absence of an interface prevents O–H bond cleavage. These findings suggest that gamma radiation selectively breaks C–C bonds to initiate cross-link formation while maintaining the integrity of the $-\text{COOH}$ groups responsible for the bioadhesive properties of acrylic acid as a DDS material.

مستخلص البحث

رحمن، أنيسة حياتون نفوس. 2026. آلية التحليل الإشعاعي لحمض الأكريليك نتيجة الإشعاع الغاما كتطبيق لنظام توصيل الدواء. بحث جامعي. قسم الفيزياء، كلية العلوم والتكنولوجيا، جامعة مولانا مالك إبراهيم الإسلامية الحكومية مالانج. المشرفون: (1) حسن اليقين، الماجستير، (2) الدكتوراه أمية الشريفة، الماجستير.

الكلمة الرئيسية: حمض الأكريليك، الإشعاع غاما، التحلل الإشعاعي، نظرية الوظائف الكثافة، الديناميكيات الجزيئية المستندة إلى أول المبادئ، الربط العرضي، نظام توصيل الدواء .

حمض الأكريليك هو مادة تُعرف في شكل بوليمر باسم بولي أكريليك أسيد، وتُستخدم كثيرًا كمادة في نظام توصيل الدواء (DDS) بسبب خصائصها اللاصقة الحيوية وقدرتها على تكوين شبكات متشابكة نتيجة التعرض لإشعاع غاما. يحدث الترابط المتقاطع في بولي أكريليك أسيد نتيجة لتفكك مجموعات الكربوكسيل (COOH) بالإشعاع. فهم آلية تفكك مجموعات الكربوكسيل (COOH) في حمض الأكريليك مهم جدًا لتحديد ظروف الإشعاع المثلى في تطوير مواد DDS القائمة على البوليمر. تهدف هذه الدراسة إلى تحليل نموذج الهندسة لمونومرات، ثنائيات، وثلاثيات حمض الأكريليك التي تمتلك أقل طاقة، وتحليل التغيرات في كثافة الإلكترونات في الروابط C-C و O-H بسبب التأين، وكذلك تحديد آلية تفكك مجموعات الكربوكسيل الحاصلة في حمض الأكريليك. تم إجراء المحاكاة حسابيًا باستخدام طريقة نظرية الكثافة الدالية (DFT) مع الدالة الوظيفية CAM-B3LYP/6-311++G** المدجة مع الديناميكا الجزيئية من المنهج الغزوي (AIMD) على برنامج ORCA 0.06.0، على نموذج حمض الأكريليك في ظروف تأين مختلفة. أظهرت نتائج تحسين الهندسة طول الرابطة C-C بمقدار $1.51 \text{ \AA}$ والرابطة O-H بمقدار $0.96 \text{ \AA}$ في النماذج الثلاثة، وهو ما يتوافق مع قيم الحسابات التجريبية. أظهر تحليل فرق كثافة الإلكترون أن انخفاض كثافة الإلكترون بسبب التأين يتركز حول المجموعة COOH وأن الرابطة C-C تتعرض لانخفاض كثافة الإلكترون مع ازدياد مستوى التأين، بينما لم تظهر الرابطة O-H انخفاضًا كبيرًا. تُظهر هذه النتائج أن الرابطة C-C أكثر عرضة للتفكك بسبب التأين، ولكن ليس الرابطة O-H . تُظهر نتائج محاكاة AIMD تحليل الروابط بين الكربون-الكربون يحدث نتيجة التأين، كما تنبأت نتائج كثافة الإلكترونات، كما أن نتائج AIMD تشير أيضًا إلى أن روابط الكربون-الكربون تتعرض للانفصال بسبب التأين، ولكن ليس للروابط O-H . تشير هذه النتائج بشكل عام إلى أن آلية تحليل الإشعاع في حمض الأكريليك هي أنه عند تعرض حمض الأكريليك للإشعاع المؤين، تتناقص كثافة الإلكترونات مما يؤدي إلى انفصال روابط C-C ، ولكن لا يحدث ذلك مع روابط O-H . هذه النتائج تختلف قليلًا عن الاكتشافات السابقة لآلية تحليل الإشعاع، بسبب عدم وجود واجهة، لذلك لا تتعرض روابط O-H للانكسار. وتشير هذه النتائج إلى أن الإشعاع الغاما يكسر بشكل انتقائي روابط C-C لتشكيل وصلات متقاطعة مع الحفاظ على سلامة مجموعة COOH المسؤولة عن الخصائص اللاصقة البيولوجية لحمض الأكريليك كمادة DDS.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Acrylic acid merupakan salah satu polimer sintesis yang banyak digunakan dalam bidang farmasi maupun rekayasa material karena memiliki sifat bioadhesif yang tinggi. Sifat ini terutama berasal dari keberadaan gugus karboksil ($-\text{COOH}$) pada rantai polimernya yang mampu membentuk interaksi hidrogen, elektrostatik, maupun ikatan silang (*crosslinking*) dengan molekul lain (D.J.T. Hill, 1992). Ikatan silang tersebut berperan penting dalam menentukan karakteristik fisik molekul acrylic acid, seperti kekuatan mekanik, serta kapasitasnya dalam mengenkapsulasi atau menjerat molekul aktif.

Dalam kondisi terpapar radiasi, khususnya radiasi ionisasi, struktur acrylic acid dapat mengalami proses radiolisis yang memengaruhi sifat kimia dan fungsinya. Radiolisis pada gugus karboksil berpotensi menurunkan kapasitas interaksi acrylic acid dengan molekul, sedangkan radiolisis pada ikatan C–H dapat menghasilkan radikal bebas yang justru memicu pembentukan ikatan silang baru di antara rantai polimer (S Anlar, 1993). Perubahan struktur akibat radiasi ini menjadi perhatian penting karena dapat memodifikasi sifat fungsional acrylic acid, baik meningkatkan maupun menurunkannya, tergantung mekanisme yang mendominasi (Ganeswar Dalei, 2022).

Drug Delivery System (DDS) merupakan suatu pendekatan ilmiah yang bertujuan untuk mengatur, mengontrol, dan mengoptimalkan pelepasan obat di dalam tubuh melalui rekayasa formulasi maupun modifikasi material. Menurut (Langer, 1998) DDS dikembangkan untuk meningkatkan efektivitas terapi dengan

meminimalkan degradasi obat, mengontrol waktu pelepasan, serta mengarahkan obat menuju lokasi target secara lebih spesifik. Pendekatan ini diperkuat oleh (Allen et al., 2017) yang menyatakan bahwa DDS dirancang untuk meningkatkan bioavailabilitas obat sekaligus mengurangi toksisitas sistemik melalui sistem penghantaran berbasis *carrier* seperti nanopartikel, hidrogel, ataupun polimer. Dengan demikian, DDS menjadi salah satu strategi yang penting dalam terapi modern, terutama dalam aplikasi obat-obatan dengan waktu paruh pendek atau stabilitas rendah (Allen et al., 2017).

Sejalan dengan perkembangan tersebut, molekul acrylic acid semakin banyak diteliti sebagai kandidat material DDS karena sifatnya yang bioadhesif, biokompatibel, serta mudah dimodifikasi untuk menghasilkan profil pelepasan obat yang terkontrol. Tinjauan komprehensif oleh G. Dalei et al. (2022) menunjukkan bahwa acrylic acid dapat diformulasikan sebagai sistem penghantaran obat oral, transdermal, maupun topikal, dengan kemampuan untuk meningkatkan stabilitas obat dan memperpanjang waktu pelepasan. Selain itu, kemampuan acrylic acid menjebak molekul lain melalui ikatan hidrogel atau jaringan *crosslinked* membuatnya sangat potensial untuk aplikasi DDS, khususnya sebagai material penjebak dan pembawa (Hemostasis et al., 2022).

Pengembangan *drug delivery system* (DDS) menjadi sangat penting karena dapat meningkatkan bioavailabilitas obat, mengurangi efek samping, serta meningkatkan kepatuhan pasien terhadap terapi (Pujitha et al., 2015). Dalam konteks ini, pemanfaatan acrylic acid sebagai material dalam DDS menunjukkan peran penting polimer dalam mengoptimalkan penggunaan obat, khususnya melalui kemampuannya dalam mengontrol pelepasan zat aktif dan meningkatkan efisiensi

penghantaran ke target terapi. Penelitian mengenai mekanisme radiolisis acrylic acid akibat radiasi gamma tidak hanya merupakan kajian ilmiah dalam bidang fisika dan material, tetapi juga membuka pemahaman lebih dalam terkait stabilitas dan kinerja material tersebut dalam sistem penghantaran obat. Dalam perspektif keilmuan Islam, upaya pengembangan material seperti acrylic acid dalam DDS dapat dimaknai sebagai bagian dari ikhtiar manusia dalam menghadirkan solusi pengobatan yang lebih efektif dan aman. Allah SWT berfirman dalam Q.S. al-Isra' (17): 82.

وَنُنَزِّلُ مِنَ الْقُرْآنِ مَا هُوَ شِفَاءٌ وَرَحْمَةٌ لِّلْمُؤْمِنِينَ وَلَا يَزِيدُ الظَّالِمِينَ إِلَّا خَسَارًا ﴿٨٢﴾

Artinya: “Kami turunkan dari al-Qur'an sesuatu yang menjadi penawar dan rahmat bagi orang-orang mukmin, sedangkan bagi orang-orang zalim (Al-Qur'an itu) hanya akan menambah kerugian”

Q.S. al-Isra' (17): 82 memberikan landasan bahwa konsep penyembuhan merupakan bagian penting dalam kehidupan manusia, yang dapat diwujudkan melalui berbagai bentuk usaha, termasuk pengembangan teknologi material sebagai media penghantaran obat (Rizqia, 2020).

Molekul acrylic acid diaplikasikan dalam *drug delivery system* (DDS) melalui pembentukan *cross-linking* yang diperoleh melalui penyinaran radiasi gamma. Radiasi gamma dengan energi tinggi dapat berinteraksi langsung dengan atom-atom penyusun acrylic acid melalui mekanisme efek Compton, yang kemudian memicu proses radiolisis. Radiolisis ini memungkinkan pemutusan ikatan kimia pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$), terutama pada ikatan O-H dan ikatan C-C dalam rantai polimer. Proses itu memengaruhi seberapa kuat ikatan kimia dalam obat. Studi oleh (Jeong et al., 2019) mengkonfirmasi mekanisme ini melalui

analisis spektrum FTIR dan XPS yang menunjukkan pembentukan radikal dan *cross-linking* akibat paparan radiasi gamma dengan dosis yang dapat dikontrol.

Radiasi pengion, khususnya radiasi gamma, memiliki energi tinggi yang mampu menyebabkan ionisasi, eksitasi, serta pemutusan ikatan kimia pada material. Dampak ini menjadi krusial ketika material digunakan dalam sistem penghantaran obat (*drug delivery system*), yang menuntut stabilitas struktur dan keamanan fungsional acrylic acid merupakan salah satu polimer yang banyak dimanfaatkan sebagai *carrier* karena sifat bioadhesif dan keberadaan gugus karboksil aktifnya. Namun, paparan radiasi gamma berpotensi memicu degradasi rantai polimer dan perubahan struktur molekul yang dapat memengaruhi kinerjanya.

Salah satu alternatif yang tepat untuk memahami mekanisme radiolisis mekanisme pada acrylic acid yaitu dengan pemodelan komputasi. Mekanisme radiolisis gugus karboksil pada acrylic acid dilakukan menggunakan *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT). Dengan kombinasi dua metode ini, diharapkan dapat memberikan pemahaman komprehensif mengenai mekanisme radiolisis pada acrylic acid yang dapat menjadi dasar pengetahuan dalam pengembangan *drug delivery system* (DDS).

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah dari penelitian ini yaitu:

1. Bagaimana model geometri jumlah monomer acrylic acid pada energi yang paling stabil?

2. Bagaimana pola distribusi elektron pada gugus karboksil acrylic acid pada berbagai tingkat ionisasi?
3. Bagaimana mekanisme radiolisis gugus karboksil yang terjadi pada acrylic acid?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Menganalisis model geometri jumlah monomer acrylic acid pada energi yang paling stabil.
2. Menganalisis pola distribusi elektron pada gugus karboksil acrylic acid pada berbagai tingkat ionisasi.
3. Mengidentifikasi proses dan mekanisme radiolisis gugus karboksil yang terjadi pada acrylic acid.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini yaitu:

1. Manfaat Teoritis

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan pemahaman mengenai mekanisme radiolisis pada molekul acrylic acid akibat radiasi gamma sebagai aplikasi *Drug Delivery System* (DDS). Hasilnya diharapkan dapat memperkaya kajian dalam bidang komputasi, fisika material, dan radiokimia, serta menjadi referensi ilmiah bagi penelitian selanjutnya.

2. Manfaat Praktis

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

1.5 Batasan Masalah

Batasan masalah dari penelitian ini yaitu:

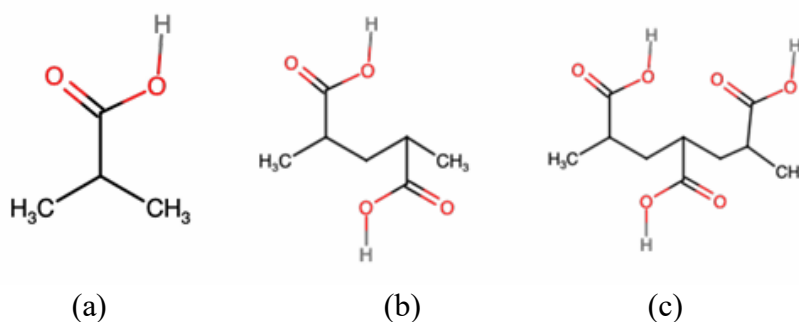
1. Material yang dikaji dibatasi pada material acrylic acid murni tanpa penambahan zat aditif atau modifikasi kimia lainnya.
2. Jenis radiasi yang dianalisis adalah radiasi gamma dengan fokus pada efek ionisasi dan pemutusan ikatan pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$), khususnya ikatan C–C dan O–H.
3. Analisis radiolisis dilakukan secara teoretis dan komputasi, menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) untuk mengamati perubahan model geometri dan kerapatan elektron.
4. Parameter yang dikaji hanya mencakup probabilitas ionisasi, pola distribusi kerapatan elektron, dan mekanisme pembentukan radikal serta *cross-linking* akibat radiasi gamma.
5. Penelitian tidak mencakup uji eksperimental terhadap material acrylic acid secara langsung, melainkan dibatasi pada pemodelan komputasi sebagai pendekatan utama.
6. Aplikasi *Drug Delivery System* (DDS) yang dibahas difokuskan pada implikasi hasil simulasi terhadap kestabilan dan kemampuan acrylic acid dalam mengikat molekul obat, tanpa melakukan perancangan atau pengujian sistem DDS secara nyata.

BAB II

KAJIAN PUSTAKA

2.1 Acrylic Acid

Acrylic acid adalah polimer anionik dengan rumus molekul $(\text{CH}_2-\text{CHCO}_2\text{H})_n$ yang merupakan turunan dari asam akrilat ($\text{CH}_2=\text{CHCO}_2\text{H}$). Struktur kimianya, yang ditunjukkan pada Gambar 1, terdiri dari rantai utama karbon dengan gugus karboksil ($-\text{COOH}$) pada setiap unit, yang dapat terdeprotonasi sehingga menghasilkan muatan negatif. Acrylic acid bersifat hidrofilik dan mampu menyerap serta menahan air dalam jumlah besar, sehingga membengkak secara signifikan. Polimer ini larut dalam air pada pH netral dan memiliki sifat asam-basa yang penting di berbagai aplikasi (Romadhoni, 2022).



Gambar 2.1 Geometri Struktur Kimia dari Acrylic acid (a) Struktur monomer Acrylic acid (b) Struktur Dimer Acrylic acid (c) Struktur Trimer Acrylic acid (Yakin, 2025).

Acrylic acid tidak memiliki titik lebur yang jelas karena bersifat amorf; polimer ini hanya menunjukkan *glass transition temperature* (T_g) sekitar 100–110 °C, sedangkan pada pemanasan di atas 200–250 °C acrylic acid mengalami dehidrasi, pembentukan crosslink, dan mulai terdegradasi (Sulaeman et al., 2022).

Pengikatan silang adalah proses menghubungkan rantai (acrylic acid) bersama melalui ikatan kovalen (Kanbua et al., 2022). Mekanisme pembentukan

ikatan silang (*cross-linking*) pada acrylic acid terjadi melalui agen pengikat yang menghubungkan rantai-rantai polimer membentuk jaringan tiga dimensi yang meningkatkan kekuatan mekanik dan stabilitas jaringan polimer itu sendiri. Degradasi acrylic acid dapat berlangsung melalui dekarboksilasi pada suhu tinggi atau hidrolisis di lingkungan yang sesuai, sehingga gugus karboksil hilang dan sifat polimer berubah. Proses *cross-linking* ini penting dalam pengembangan hidrogel dan material bioadhesif (Nakan et al., 2022).

Sifat bioadhesif acrylic acid sangat bergantung pada gugus karboksilnya yang dapat membentuk ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik dengan molekul biologis, meningkatkan kapabilitas adhesi pada jaringan biologis seperti mukosa. Gugus ini juga memfasilitasi pembentukan jembatan ion dengan kation seperti Mg^{2+} , memperkuat adhesi yang berguna dalam aplikasi medis seperti pembawa obat dan produk bioadhesif. Hal ini menjadikan acrylic acid bahan unggulan untuk aplikasi dalam *drug delivery system* dan produk medis lainnya yang memerlukan adhesi spesifik dan tahan lama (Romadhoni, 2022).

Degradasi dan stabilitas acrylic acid sangat dipengaruhi oleh kondisi radiasi dan konsentrasi polimer dalam larutan. Menurut Jabbari dan Nozari (2015), paparan radiasi gamma pada larutan acrylic acid menyebabkan pembentukan radikal bebas akibat interaksi energi tinggi dengan rantai polimer dan molekul air. Mekanisme degradasi dimulai ketika ikatan kovalen dalam acrylic acid terputus oleh radiasi, menghasilkan radikal polimer acrylic acid dan radikal hidrogen (H). Radikal hidroksil (OH) yang dihasilkan dari radiolisis air juga dapat bereaksi dengan rantai polimer, mempercepat proses degradasi melalui pemutusan rantai (*chain scission*) (Jabbari & Nozari, 2015).

Pada konsentrasi polimer yang tinggi, laju degradasi meningkat karena jarak antar rantai polimer lebih pendek, sehingga reaksi transfer radikal antar rantai lebih sering terjadi. Sebaliknya, pada konsentrasi rendah, proses degradasi bersaing dengan reaksi pembentukan ikatan silang (*cross-linking*), yang menyebabkan struktur jaringan menjadi lebih stabil. Hasil penelitian menunjukkan bahwa peningkatan dosis radiasi (5–25 kGy) menurunkan berat molekul rata-rata antar ikatan silang dan mengindikasikan bahwa degradasi menjadi dominan pada dosis tinggi. Fenomena ini memperlihatkan bahwa radiasi gamma tidak hanya dapat menyebabkan degradasi, tetapi juga berperan dalam pengendalian sifat mekanik dan morfologi acrylic acid, tergantung pada kondisi pemrosesan dan dosis radiasi yang diberikan (Jabbari & Nozari, 2015).

Konversi polimer menjadi produk untuk tujuan medis melalui perlakuan radiasi melibatkan evaluasi efek pemrosesan yang mencakup kompetisi antara berbagai faktor seperti dosis paparan, laju dosis, rasio antara hasil *cross-linking* dan *scission* (pemecahan rantai), formulasi, stabilitas terhadap oksidasi, dan biokompatibilitas (Saravanakumar et al., 2015). Pembentukan radikal tertentu dari *scission* polimer yang diiradiasi merupakan titik awal penyesuaian struktural yang memungkinkan polimer direkomendasikan untuk konversi menjadi produk yang dapat diterima secara medis (Nanogels et al., 2023). Fitur yang harus dipertimbangkan sebagai faktor fundamental yang menentukan evolusi modifikasi adalah struktur molekular polimer itu sendiri (Abuhanoğlu & Özer, 2014).

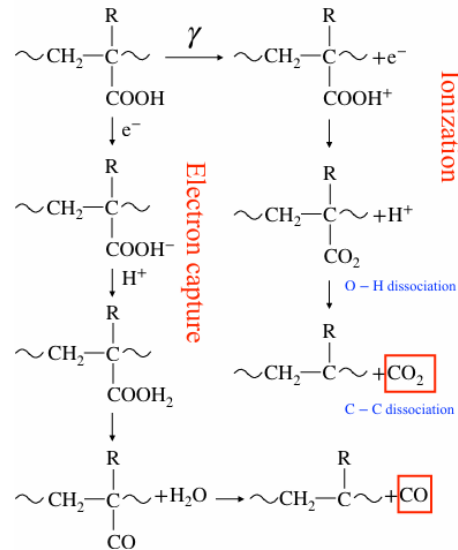
2.2 Mekanisme Interaksi Radiasi Gamma dengan Materi

Radiasi gamma merupakan radiasi elektromagnetik berenergi tinggi yang mampu menembus material dan berinteraksi dengan molekul organik atau polimer melalui proses ionisasi dan eksitasi (Bhattacharya, 2012). Radiasi ini memiliki frekuensi tertinggi dan panjang gelombang paling pendek, sehingga daya tembusnya sangat besar hingga mampu menembus material padat seperti timbal dengan ketebalan beberapa sentimeter (Jafari et al., 2021). Salah satu sumber sinar gamma yang banyak digunakan adalah radioisotop Cobalt-60, yang memancarkan foton gamma berenergi sekitar 1,17 MeV dan 1,33 MeV (Bazyka et al., 2019).

Ketika sinar gamma berinteraksi dengan materi, terutama polimer seperti acrylic acid, terjadi proses ionisasi dan eksitasi yang berlangsung sangat cepat. Foton gamma melepaskan energi melalui mekanisme efek Compton, yaitu ketika foton gamma menumbuk elektron, menyebabkan elektron terlepas dengan energi tinggi, sedangkan foton kehilangan sebagian energinya. Elektron Compton inilah yang menjadi pemicu utama kerusakan molekuler pada polimer (Clough, 2001).

Mekanisme radiolisis pada gugus karboksil acrylic acid melibatkan serangkaian proses fisika dan kimia yang dimulai dari ionisasi, pelepasan elektron, serta pembentukan radikal akibat interaksi sinar gamma melalui efek Compton. Proses ini menghasilkan pemutusan ikatan O–H maupun C–C serta pembentukan produk radiolisis seperti CO dan CO₂. (Naikwadi et al., 2022). Secara keseluruhan, jalur reaksi tersebut memperlihatkan bagaimana energi radiasi menginisiasi perubahan struktural pada acrylic acid melalui kombinasi antara ionisasi langsung dan reaksi lanjutan dari radikal sekunder yang terbentuk (Bhattacharya, 2012).

Mekanisme detail dari tahapan ini divisualisasikan secara jelas seperti ditunjukkan pada Gambar 2.2.



Gambar 2.2 Mekanisme Efek Radiolisis Gamma (Campbell et al, 1989)

2.3 Mekanisme Radiolisis pada Polimer

Radiolisis merupakan proses kimia yang terjadi akibat interaksi antara radiasi pengion (seperti sinar gamma, sinar X, atau partikel bermuatan) dengan suatu medium, terutama air atau senyawa yang mengandung molekul polar. Menurut Jay-Gerin (2025) dalam *Fundamentals of Water Radiolysis*, radiolisis didefinisikan sebagai dekomposisi molekul akibat absorpsi energi radiasi yang menghasilkan spesies reaktif seperti radikal hidroksil ($\bullet\text{OH}$), elektron terhidrasi (e_{aq}^-), dan atom hidrogen ($\text{H}\bullet$). Proses ini sangat penting dalam memahami efek radiasi terhadap sistem biologis, material polimer, dan reaktor nuklir, karena radikal-radikal tersebut dapat memicu serangkaian reaksi kimia lanjutan yang memengaruhi stabilitas suatu sistem (Gerin, 2025).

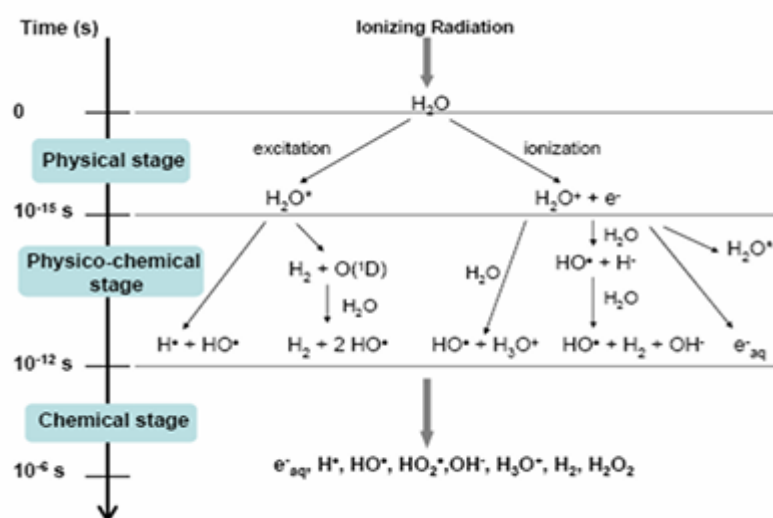
Secara umum, proses radiolisis berlangsung dalam beberapa tahapan utama yang dibedakan berdasarkan skala waktu reaksi. Tahapan pertama disebut tahap

fisik (*physical stage*), yaitu proses awal di mana energi radiasi diserap oleh medium dalam rentang waktu yang sangat singkat (sekitar 10^{-15} detik). Pada tahap ini, terjadi ionisasi dan eksitasi molekul air atau senyawa target, menghasilkan molekul bermuatan seperti H_2O^+ dan elektron bebas. (Macdonald, 2022) dalam *A Critical Review of Radiolysis Issues in Water-Cooled Reactors* menjelaskan bahwa energi yang diserap akan menciptakan jalur ionisasi (*track structure*) yang menjadi dasar pembentukan spesies radikal pada tahap berikutnya.

Tahap kedua disebut tahap fisikokimia (*physico-chemical stage*), berlangsung pada skala waktu antara 10^{-15} hingga 10^{-12} detik. Dalam tahap ini, spesies terionisasi dan tereksitasi yang terbentuk pada tahap awal mengalami relaksasi dan reorganisasi, membentuk radikal dan molekul metastabil seperti H_2O , H_2O^+ , $\text{H}^\bullet$, dan $\bullet\text{OH}$. Menurut (Uehara, 2006), pada tahap ini juga terjadi solvasi elektron bebas menjadi elektron terhidrasi (e_{aq}^-), yang merupakan salah satu spesies paling reaktif dalam sistem berair. Proses ini sangat menentukan jumlah dan distribusi produk kimia yang akan terbentuk pada tahap selanjutnya.

Tahapan terakhir disebut tahap kimia (*chemical stage*), di mana reaksi antar spesies radikal berlangsung hingga mencapai keadaan stabil. Tahap ini terjadi pada skala waktu antara 10^{-12} hingga 10^{-6} detik, bahkan dapat berlanjut hingga 10^{-3} detik untuk reaksi sekunder dalam medium besar. (Gerin, 2025) dan Ma et al. (2019) menyebut bahwa dalam tahap ini terbentuk produk akhir seperti hidrogen peroksida (H_2O_2), gas hidrogen (H_2), serta ion-ion seperti OH^- dan H_3O^+ . Produk-produk tersebut merupakan hasil reaksi antar radikal bebas, dan jumlahnya dapat diukur melalui nilai *G-value*, yaitu jumlah molekul yang dihasilkan per 100 eV energi yang diserap.

Secara keseluruhan, radiolisis merupakan fenomena kompleks yang melibatkan interaksi fisika, kimia, dan kinetika reaksi yang saling berkesinambungan. Menurut tinjauan (Macdonald, 2022), tahapan-tahapan radiolisis dapat digunakan untuk memprediksi efek radiasi pada berbagai sistem, termasuk pelarut, biomolekul, maupun material polimer. Pemahaman terhadap tahapan ini juga penting dalam bidang rekayasa material dan farmasi, karena radikal hasil radiolisis dapat menyebabkan degradasi, polimerisasi, atau modifikasi struktur molekul tergantung pada kondisi dan jenis radiasi yang digunakan (Gerin, 2025).



Gambar 2.3 Reaksi Utama yang Terjadi pada Radiolisis (Jeong et al., 2019).

2.4 Drug Delivery System (DDS)

Drug Delivery System (DDS) didefinisikan sebagai formulasi atau sistem yang mampu memediasi penghantaran zat terapeutik dalam tubuh untuk meningkatkan efek terapi, mengurangi efek samping obat, meningkatkan bioavailabilitas serta meningkatkan kepatuhan pasien (Yurasih et al., 2023).

Proses ini meliputi pemberian produk terapeutik, pelepasan bahan aktif oleh

produk, dan pengangkutan selanjutnya bahan aktif melintasi membran biologis ke lokasi kerja.

Drug Delivery System (DDS) merupakan teknologi formulasi farmasi yang dirancang untuk mengantarkan obat ke lokasi target dalam tubuh secara efisien, selektif, dan terkontrol, dengan tujuan meningkatkan efektivitas terapi sekaligus mengurangi efek samping (Patra et al., 2018). *Drug Delivery System* berkembang dari kebutuhan untuk mengoptimalkan efektivitas obat, meminimalkan toksisitas, serta meningkatkan kenyamanan pasien dalam terapi farmasetis (Nanogels et al., 2023)

Prinsip kerja DDS berfokus pada pengendalian proses pelepasan dan distribusi obat di dalam tubuh. Melalui rekayasa ukuran partikel hingga skala nanometer, sistem ini memungkinkan obat menembus berbagai penghalang biologis seperti membran sel atau jaringan tertentu yang sebelumnya sulit ditembus (Nanogels et al., 2023). Teknologi nanopartikel sebagai bagian dari DDS memiliki kemampuan unik dalam meningkatkan bioavailabilitas obat, memperpanjang waktu sirkulasi dalam darah, dan memungkinkan penghantaran obat secara tertarget. Hal ini dilakukan dengan memodifikasi permukaan partikel menggunakan ligan atau molekul penarget (*targeting agent*), sehingga obat hanya berikatan dengan sel atau jaringan sasaran (Galvin et al., 2012).

Selain itu, *Drug Delivery System* (DDS) memungkinkan peningkatan efisiensi terapi dengan dosis yang lebih kecil karena obat lebih banyak mencapai lokasi target. Pada kasus tertentu, seperti terapi kanker atau penyakit kronis, DDS tertarget mampu mengantarkan obat langsung ke sel yang sakit melalui mekanisme pengenalan spesifik antara ligan dan reseptor, misalnya menggunakan aptamer,

protein, atau gula terkonjugasi sebagai molekul penarget (Martien et al., 2012). Dengan demikian, sistem ini tidak hanya meningkatkan efektivitas pengobatan, tetapi juga mengurangi risiko efek samping sistemik (Sun et al., 2024).

2.5 Peran Material Polimer dalam DDS

Material polimer memiliki peran yang sangat penting dalam sistem penghantaran obat *Drug Delivery System* (DDS), terutama pada DDS modern yang menuntut kontrol pelepasan obat serta efektivitas penghantaran ke target tertentu. Polimer dapat berfungsi sebagai *carrier* atau matriks pembawa obat, yang melindungi zat aktif dari degradasi prematur akibat kondisi fisiologis tubuh seperti enzim, pH, atau senyawa metabolik. Dengan perlindungan tersebut, obat dapat mencapai lokasi target dengan konsentrasi yang optimal sehingga meningkatkan efisiensi terapi. Penggunaan polimer biodegradable pada DDS memungkinkan proses pelepasan obat yang terkontrol sambil menjaga stabilitas obat karena polimer akan terdegradasi secara alami dalam tubuh tanpa meninggalkan residu toksik (Nayan et al., 2024).

Pemilihan acrylic acid sebagai material dalam sistem penghantaran obat (DDS) dibandingkan dengan poly(lactic-co-glycolic acid) (PLGA) didasarkan pada keunggulan karakteristik acrylic acid yang bersifat hidrofilik, mucoadhesive, dan responsif terhadap perubahan pH. Acrylic acid memiliki kemampuan untuk berinteraksi dengan permukaan mukosa melalui ikatan hidrogen, sehingga mampu meningkatkan waktu retensi obat dan bioavailabilitas pada penghantaran transmukosa atau topikal (Angelo, 2001).

Keunggulan acrylic acid sebagai material DDS yang bersifat hidrofilik, mucoadhesive, dan pH-responsif retensi mukosa dan pelepasan obat spesifik pada

lokasi dengan pH tertentu telah dilaporkan dalam literatur tentang hidrogela dan polimer pH-sensitif. Menurut (Rizwan et al., 2017) acrylic acid menunjukkan pembengkakan dan pelepasan yang bergantung pH serta kemampuan pembentukan ikatan hidrogen dengan mukosa) (Rizwan et al., 2017). Selain itu, ulasan tentang polimer stimulus-responsif menjelaskan bagaimana sifat pH-sensitif seperti halnya pada acrylic acid dimanfaatkan untuk penghantaran obat bertarget berbasis stimulus, sehingga acrylic acid cocok untuk DDS yang membutuhkan mucoadhesi dan pelepasan berbasis pH.

Selain mengontrol pelepasan obat, polimer tertentu memiliki sifat mucoadhesive, yaitu kemampuan untuk menempel pada permukaan mukosa yaitu pada mulut, gastrointestinal, mata, dan hidung. Sifat ini memungkinkan obat bertahan lebih lama di lokasi penghantaran sehingga meningkatkan bioavailabilitas dan efisiensi penyerapan obat. Acrylic acid dan kitosan adalah contoh polimer yang memiliki sifat tersebut (Ways & Lau, 2018).

Peran lain dari polimer dalam DDS adalah sebagai platform untuk sistem penghantaran obat yang responsif terhadap stimulus tertentu. Polimer dapat direkayasa untuk merespons perubahan pH, suhu, atau keberadaan enzim di lingkungan target sehingga obat hanya dilepaskan pada kondisi tertentu. Sistem ini dikenal sebagai *stimuli-responsive polymeric drug delivery* dan sangat potensial dalam terapi penyakit seperti kanker, karena pelepasan obat dapat berlangsung hanya pada jaringan yang memiliki kondisi biologis yang berbeda dengan jaringan sehat. (Li et al., 2022) menjelaskan bahwa polimer responsif enzim dan pH dapat membentuk mikela polimerik yang stabil dalam sirkulasi darah, kemudian melepaskan obat secara selektif di lingkungan target seperti jaringan tumor. Dengan

demikian, polimer tidak hanya berfungsi sebagai *carrier* pasif tetapi juga sebagai komponen aktif dalam menentukan lokasi dan waktu pelepasan obat (Ways & Lau, 2018).

2.6 *Density Functional Theory (DFT)*

Komputasi prinsip pertama (*first-principles calculation*) atau yang sering dikenal dengan *ab initio* merupakan metode teoritis untuk menghitung suatu fenomena fisika dengan parameter yang sesuai sekecil mungkin (Wella et al., 2021). Persamaan Schrödinger adalah dasar perhitungan *ab initio* (Teale et al., 2022). Pada dasarnya persamaan Schrödinger dapat mengidentifikasi semua besaran fisis dalam sistem kuantum (Purqon, 2015). Persamaan Schrödinger dapat diselesaikan secara analitis untuk contoh sederhana seperti atom hidrogen dengan satu proton dan satu elektron (Yakin, 2024). Namun persamaan Schrödinger sulit dilakukan secara analitis untuk menghitung struktur dan interaksi elektron-elektron pada banyak atom, sehingga dibutuhkan teknik komputasi untuk menyelesaikannya (Ahmad, 2024).

W. Kohn memperkenalkan metode yang dapat menyederhanakan perhitungan kuantum dalam kasus banyak partikel yang dikenal sebagai *Density Functional Theory (DFT)*. Ide utama DFT muncul dari teori Hohenberg-Kohn dimana kerapatan elektron dalam keadaan dasar secara prinsip dapat digunakan untuk menghitung fungsi gelombang dalam keadaan dasar (Purqon, 2015). Fungsi gelombang yang biasanya didefinisikan dalam fungsi dari banyak variabel dapat diganti dengan fungsi gelombang yang merupakan fungsional dari kerapatan elektron saja (Hauwali, 2024).

2.6.1 Mekanika Kuantum Banyak Partikel

Pada sistem fisis dalam material, tinjauan studi kuantum ini melibatkan dua jenis partikel, yaitu inti dan elektron (Ahmad, 2024). Konfigurasi elektronik dalam material didefinisikan dari interaksi-interaksi antara elektron dan inti yang terlibat dalam material tersebut. Konfigurasi elektronik ini dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan schrodinger untuk banyak partikel. Jika sistem diasumsikan dalam keadaan tunak, persamaan schrodinger memiliki bentuk sebagai berikut (Purqon, 2015):

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.1)$$

Dengan bentuk hamiltonian pada banyak partikel (Purqon, 2015):

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

Di mana M dan Z masing-masing adalah massa inti dan nomor atom. Untuk penyederhanaan, $\hbar = m_e = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ dan persamaan (2.2) dapat dibagi lima suku yang dilambangkan sebagai persamaan (2.3) (Yakin, 2024).

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en} \quad (2.3)$$

Di mana:

T_e = operator energi kinetik electron

T_n = operator energi kinetik inti

V_{ee} = operator energi potensial interaksi elektron-elektron

V_{nn} = operator energi potensial interaksi inti-inti

V_{en} = operator energi potensial interaksi elektron-inti.

2.6.2 Pendekatan Born-Oppenheimer

Persamaan (2.3) 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 (Kohn, 1996):

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

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

$$\hat{H} \psi = \left[-\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i,I} \frac{Z}{|r_i - R|} \right] \psi = E \psi \quad (2.5)$$

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 (Yakin, 2024):

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

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 Stidak 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-simerti 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 $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ (Kohn et al., 1996). Hal ini muncul dari ide bahwa untuk suatu nilai $n(\vec{r})$ tertentu, maka akan merepresentasikan fungsi gelombang yang tertentu pula. Secara umum, terdapat 2 teorema Hohenberg-Kohn untuk

menentukan operator Hamilton dan sifat-sifat sistem berdasarkan kerapatan elektron yang berbunyi (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 antar 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 (Kohn et al., 1996):

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

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*.

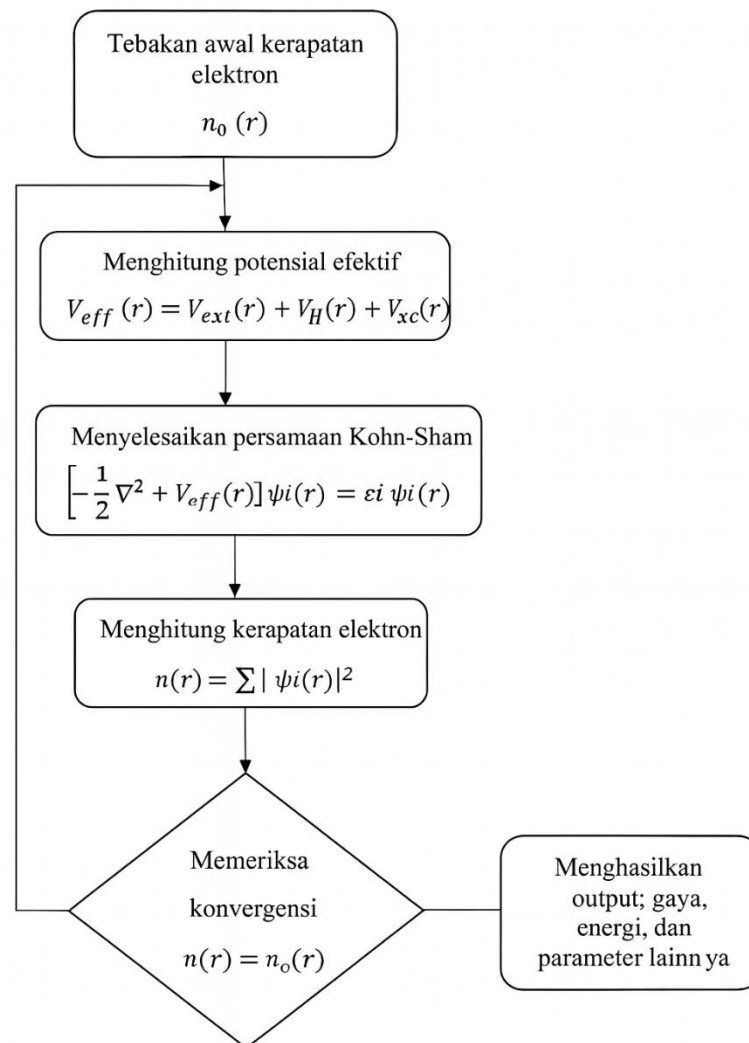
Energi *exchange-correlation* ini merupakan bentuk koreksi energi dari pendekatan Kohn-Sham. Energi *exchange* merupakan koreksi energi akibat dari dua partikel yang saling dipertukarkan. Sementara energi *correlation* merupakan koreksi energi berupa selisih energi antara sistem partikel yang saling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

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

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 (Ahmad, 2024).



Gambar 2.4 Perhitungan *Density Functional Teory* (DFT) (Yakin, 2024).

2.7 *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD)

Komputasi prinsip pertama (*first-principles calculation*) atau yang sering dikenal dengan *ab initio* merupakan metode teoritis untuk menghitung suatu fenomena fisika dengan parameter yang sesuai sekecil mungkin (Wella et al., 2021). Perhitungan *ab initio* didasarkan pada persamaan kuantum, yaitu persamaan Schrödinger (Yakin, 2024). Pada dasarnya persamaan Schrödinger dapat mengidentifikasi semua besaran fisis dalam sistem kuantum (Rahman & Purqon, 2015). Persamaan Schrödinger dapat diselesaikan secara analitis untuk contoh sederhana seperti atom hidrogen dengan satu proton dan satu elektron (Yakin, 2024). Namun persamaan Schrödinger sulit dilakukan secara analitis untuk menghitung struktur dan interaksi elektron-elektron pada banyak atom, sehingga dibutuhkan teknik komputasi untuk menyelesaikannya (Togatorop & Ahmad, 2024).

Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) merupakan metode simulasi yang menggabungkan dinamika molekul klasik menggunakan teori *first principles* seperti *Density Functional Theory* (DFT). Pendekatan ini dikembangkan untuk mengatasi keterbatasan *classical force fields* yang tidak mampu menggambarkan perubahan ikatan kimia dan efek polarisasi elektron secara akurat (Iftimie et al., 2005). Oleh karena itu, AIMD memungkinkan peristiwa kimia seperti pembentukan dan pemutusan ikatan, transfer proton, reaksi permukaan, dan dinamika elektron untuk disimulasikan dalam kondisi suhu hingga lingkungan yang kompleks, menjadikannya salah satu teknik paling kuat dalam kimia komputasi modern (Parrinelo, 1985).

Landasan utama AIMD adalah *Density Functional Theory* (DFT), yang memungkinkan perhitungan energi total sistem banyak elektron sebagai fungsi dari densitas elektron. Prinsip ini pertama kali dirumuskan melalui teorema Hohenberg–Kohn oleh Pierre Hohenberg dan Walter Kohn (1964), yang menyatakan bahwa seluruh sifat keadaan dasar sistem kuantum ditentukan secara unik oleh densitas elektronnya (Ways & Lau, 2018). Dalam pendekatan AIMD, gaya yang diperoleh dari perhitungan DFT tersebut dimasukkan ke dalam persamaan gerak Newton untuk menentukan evolusi posisi atom terhadap waktu. Integrasi antara dinamika klasik inti atom dan perhitungan struktur elektronik berbasis DFT ini pertama kali diformulasikan secara komprehensif dalam metode *Car–Parrinello* oleh Roberto Car dan Michele Parrinello (1985). Dengan demikian, DFT berperan sebagai mesin perhitungan energi dan gaya elektronik, sedangkan AIMD merupakan kerangka dinamika yang memanfaatkan hasil perhitungan tersebut untuk mensimulasikan perilaku atom secara nyata (Parrinello, 1985).

Dalam *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD), dua metode yang paling banyak digunakan adalah *Born–Oppenheimer Molecular Dynamics* (BOMD) dan *Car–Parrinello Molecular Dynamics* (CPMD). Kedua metode ini sama-sama menggunakan persamaan Schrödinger untuk menentukan energi elektronik, namun berbeda dalam cara menangani hubungan antara dinamika inti dan elektron. Pada BOMD, fungsi gelombang elektronik diselesaikan hingga mencapai keadaan dasar (*ground state*) melalui prosedur *self-consistent field* pada setiap langkah simulasi. Hal ini memberikan akurasi energi yang tinggi, tetapi prosesnya sangat memakan waktu karena optimasi elektronik terus diulang. Sebaliknya, CPMD memperkenalkan massa fiktif pada orbital elektronik sehingga elektron dapat

bergerak secara dinamis mengikuti gerak inti tanpa proses SCF berulang (Sauer, 1989).

Dengan cara ini, CPMD mampu mempercepat simulasi secara signifikan, terutama untuk sistem yang besar atau simulasi jangka panjang, meskipun ketepatannya bergantung pada pemilihan parameter massa fiktif dan langkah waktu yang tepat. Secara umum, BOMD digunakan ketika diperlukan akurasi energi yang sangat tinggi, sedangkan CPMD lebih sesuai untuk studi material atau polimer yang menuntut efisiensi komputasi (Paquet, 2018).

Secara konseptual, AIMD didasarkan pada pemisahan Gerak inti dan elektron melalui pendekatan Born-Oppenheimer, dimana inti dianggap bergerak secara klasik pada permukaan energi potensial yang ditentukan oleh energi elektronik keadaan dasar. Dalam pendekatan ini, diasumsikan bahwa massa inti jauh lebih besar dibandingkan elektron sehingga elektron dapat dianggap selalu berada pada keadaan dasar (*ground state*) untuk setiap posisi inti. Dengan demikian, persamaan Schrödinger elektronik diselesaikan secara self-consistent pada setiap langkah waktu untuk memperoleh permukaan energi potensial tempat inti bergerak. Persamaan dasar yang menggambarkan interaksi elektron dalam medan inti dinyatakan sebagai (Parrinello et al., 2007)

$$\left[\sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_{n-e}(\{r_i\}, \{R_I(t)\}) \right] \psi_0 = E_0 \psi_0 \quad (2.17)$$

di mana V_{n-e} adalah potensial interaksi elektron–inti, ψ_0 adalah fungsi gelombang elektronik keadaan dasar, dan E_0 merupakan energi total elektron. Gerak inti kemudian ditentukan oleh persamaan newton, sebagaimana ditampilkan pada artikel sebagai Persamaan (1): (Iftimie et al., 2005)

$$M_I \ddot{R}_I = -\nabla_I [E_0(R) + V_{NN}(R)] \quad (2.18)$$

dengan $E_0(R)$ merupakan energi elektronik keadaan dasar pada konfigurasi inti R . Persamaan ini menjadi dasar metode *Born–Oppenheimer Molecular Dynamics* (BOMD), di mana gaya dihitung dari minimisasi fungsional energi Kohn–Sham setiap langkah waktu (Iftimie et al., 2005). Dalam AIMD, perhitungan energi elektronik biasanya dilakukan menggunakan formulasi Kohn–Sham (DFT), di mana energi total dinyatakan sebagai fungsional dari orbital elektron $\psi_i(r)$ (Iftimie et al., 2005).

Fungsional ini diselesaikan dengan meminimalkan energi terhadap orbital elektron, dan hasil minimisasi digunakan untuk menghitung gaya pada inti. Pendekatan ini memberikan akurasi tinggi, namun membutuhkan biaya komputasi besar karena kalkulasi elektronik dilakukan berulang pada setiap langkah integrasi (Parrinelo, 1985).

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Jenis Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian komputasi teoretis yang bertujuan menganalisis mekanisme radiolisis pada molekul acrylic acid akibat paparan radiasi gamma dalam kaitannya dengan aplikasinya pada drug delivery system (DDS). Penelitian ini menggunakan analisis *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) yang dikombinasikan dengan *Density Functional Theory* (DFT) untuk mempelajari perubahan kerapatan elektron dan panjang ikatan pada molekul acrylic acid. Dengan metode ini, penelitian bersifat komputasi berbasis simulasi numerik yang memberikan gambaran teoritis mengenai pengaruh radiasi gamma terhadap stabilitas dan fungsi polimer acrylic acid sebagai material penghantaran obat.

3.2 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan selama bulan Oktober 2025 sampai bulan April 2026, bertempat di Labolatorium Listrik Magnet, Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

3.3 Alat dan Bahan

3.3.1 Perangkat Keras

Penelitian ini dilakukan dengan menjalankan simulasi menggunakan laptop, dengan spesifikasi yang disajikan pada Tabel 3.1.

Tabel 3.1 Perangkat Keras

No	Perangkat Keras	Spesifikasi
1	Laptop	Merek Acer Aspire AL14-31P, sistem operasi windows 11 Home Single Language, Processor Intel(R) N100 (800 MHz), 4 Core(s), 4 Logical Processor(s) RAM 8,00 GB
2	Workstation	Intel ^(R) xeon (R) CPU E-5 v3 @2.30GHz x Memory 62,8 GiB

3.3.2 Perangkat Lunak

Dalam menjalankan simulasi ini, diperlukan beberapa perangkat lunak yang perlu di instal dalam laptop atau komputer. Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian disajikan pada Tabel 3.2

Tabel 3.2 Perangkat Lunak

No	Perangkat Lunak	Fungsi
1	Avogadro 1.2.0	Membuat model geometri awal molekul acrylic acid terionisasi serta disimpan dalam format .xyz atau .cml
2	VESTA 3.90.5a	Menampilkan hasil optimasi dan memverifikasi hasil pemutusan molekul setelah proses ionisasi
3	ORCA 6.0.0	Melakukan perhitungan kuantum menggunakan metode DFT dan AIMD untuk menghitung dan memprediksi distribusi densitas elektron, pembentukan radikal, dan waktu pemutusan ikatan
4	Microsoft Excel	Mengolah data hasil perhitungan dan Menyusun tabel data hasil perhitungan
5	Microsot Word	Menyusun laporan penelitian (skripsi)
6	GNU PLOT	Membuat grafik data hasil percobaan

3.4 Variabel Penelitian

Variabel yang digunakan dalam penelitian ini, yaitu:

1. Variabel Bebas:

Variabel bebas pada simulasi ini yaitu jumlah ionisasi pada molekul acrylic acid, dan jumlah monomer molekul acrylic acid.

2. Variabel Terikat:

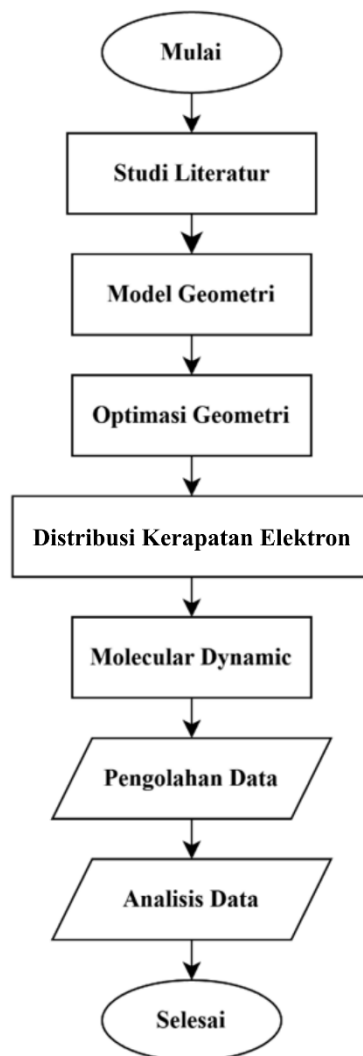
Variabel terikat pada simulasi ini yaitu distribusi elektron sekunder, dan pemutusan gugus -COOH pada molekul acrylic acid. Variabel ini diukur dari hasil simulasi AIMD.

3. Variabel Kontrol:

Variabel kontrol pada simulasi ini meliputi model geometri molekul molekul acrylic acid (geometri awal), serta energi radiasi gamma, dan kondisi batas simulasi agar hasil dapat dibandingkan secara konsisten.

3.5 Diagram Alir Penelitian

Adapun tahapan penelitian sebagai berikut:



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

3.6 Prosedur Penelitian

3.6.1 Pembuatan Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic acid

Buka aplikasi Avogadro, pilih menu *Draw setting* kemudian buat model geometri acrylic acid 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 model geometri dasar terbentuk, geometri molekul dioptimasi menggunakan fungsi *optimize geometry* yang terdapat pada menu *Extentions*.

3.6.2 Optimasi Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic acid

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 model geometri dengan energi minimum dan distribusi elektron pada molekul acrylic acid. 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.

3.6.3 Distribusi Kerapatan Elektron

1. Siapkan file (.inp) untuk optimasi geometri sesuai format perhitungan ORCA.
2. Pada blok %geom, tambahkan perintah “constrainst” 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 yang terionisasi menggunakan tautan https://cubesuite.streamlit.app/Subtract_Cube_Files.
15. Visualisasi hasil perbandingan dilakukan menggunakan perangkat lunak Vesta.

3.6.4 Validasi Hasil Penelitian

Validasi hasil dilakukan dengan membandingkan nilai energi yang diperoleh dari perhitungan komputasi dengan data hasil eksperimen terdahulu. Perbandingan dilakukan pada nilai energi disosiasi ikatan dan energi aktivasi pemutusan ikatan pada molekul acrylic acid akibat proses ionisasi yang ditimbulkan oleh paparan radiasi gamma. Jika nilai dan kecenderungan hasil perhitungan berbasis DFT/AIMD berada pada rentang yang sebanding dengan data eksperimental yang telah dipublikasikan, khususnya dalam kajian mekanisme radiolisis dan fragmentasi molekul acrylic acid, maka hasil perhitungan dianggap telah valid secara teoritis untuk menggambarkan perilaku molekul acrylic acid di bawah pengaruh radiasi.

3.7 Pengambilan Data

1. Hasil Optimasi Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic Acid

Pengambilan data hasil geometri dilakukan setelah proses optimasi yang bertujuan memperoleh bentuk geometri paling stabil dari setiap model, yaitu monomer (1-AA), dimer-AA (2-AA), dan trimer-AA (3-AA) , baik pada kondisi netral maupun bermuatan. Dari geometri yang telah teroptimasi tersebut, diperoleh data panjang ikatan C–C dan O–H pada ketiga model acrylic acid sebagai parameter utama dalam analisis geometri.

Tabel 3.3 Panjang ikatan C–C, O–H, C–H, C–O, dan C=O yang diperoleh dari hasil optimasi geometri DFT pada monomer, dimer, dan trimer acrylic acid.

Jenis Ikatan	Monomer Acrylic acid (Å)	Dimer <i>Acrylic acid</i> (Å)	Trimer <i>Acrylic acid</i> (Å)	Nilai Referensi (Å)
C–C				
O–H				
C–H				
C–O				
C=O				

2. Distribusi kerapatan elektron

Pola distribusi kerapatan elektron antara keadaan netral dan ionisasi (+1, +2 dan +3) dihitung dengan metode CAM-B3LYP/6-311++G**.

Tabel 3.4 Distribusi kerapatan elektron pada monomer acrylic acid

Ionisasi	Pola Distribusi Kerapatan Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	

Tabel 3.5 Distribusi kerapatan elektron pada dimer acrylic acid

Ionisasi	Pola Distribusi Kerapatan Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +4	

Tabel 3.6 Distribusi kerapatan elektron pada Trimer acrylic acid

Ionisasi	Pola Distribusi Kerapatan Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +6	

3. Mekanisme Radiolisis Pemutusan Ikatan C-C dan O-H pada Jumlah Monomer Acrylic Acid

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	Timer (fs)	
	O–H	C–C
Netral		
+1		
+2		

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

Ionisasi	Timer (fs)	
	O–H	C–C
Netral		
+1		
+2		
+4		

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

Ionisasi	Timer (fs)	
	O–H	C–C
Netral		
+1		
+2		
+6		

BAB IV

ANALISIS DAN PEMBAHASAN

4.1 Hasil Penelitian

Penelitian ini membahas hasil analisis mekanisme radiolisis pada polimer acrylic acid akibat paparan radiasi gamma sebagai aplikasi *drug delivery system* (DDS) yang dilakukan secara komputasi teoretis menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) berbasis perangkat lunak ORCA 6.0.0 yang dikombinasikan dengan *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) untuk menganalisis perubahan struktur, serta mekanisme pemutusan ikatan kimia pada molekul acrylic acid akibat proses ionisasi. Simulasi dilakukan pada model monomer, dimer, dan trimer acrylic acid untuk mengetahui pengaruh jumlah monomer terhadap kestabilan struktur dan proses radiolisis yang terjadi.

Dalam penelitian ini terdapat beberapa variasi parameter yang digunakan untuk mengamati pengaruh ionisasi terhadap struktur dan stabilitas polimer acrylic acid. Variasi pertama adalah jumlah monomer acrylic acid yang terdiri atas monomer acrylic acid (1-AA), dimer acrylic acid (2-AA), dan trimer acrylic acid (3-AA). Variasi kedua adalah tingkat ionisasi molekul yang disesuaikan dengan jumlah unit monomer pada masing-masing model. Pada model monomer acrylic acid, ionisasi yang digunakan yaitu +1, dan +2. Pada model dimer acrylic acid digunakan ionisasi +1, +2, dan +4, sedangkan pada model trimer acrylic acid digunakan ionisasi +1, +2, dan +6. Perbedaan tingkat ionisasi tersebut dilakukan untuk merepresentasikan peningkatan jumlah elektron yang terlepas seiring bertambahnya ukuran dan jumlah unit monomer dalam struktur acrylic acid akibat paparan radiasi gamma.

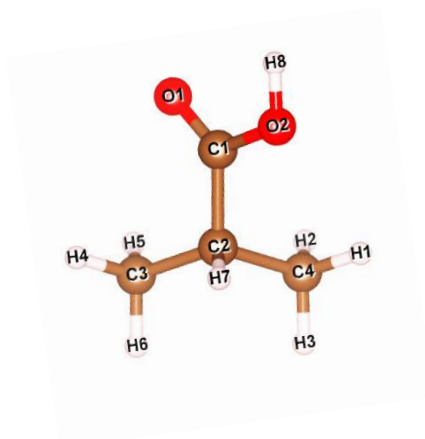
Melalui metode tersebut, penelitian ini menghasilkan data berupa model geometri optimum, perubahan *electron density difference*, serta waktu disosiasi ikatan C–C dan O–H pada gugus karboksil acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi. Hasil analisis ini digunakan untuk mengidentifikasi mekanisme radiolisis yang paling dominan serta memahami pengaruh radiasi gamma terhadap stabilitas acrylic acid sebagai material penghantar obat.

4.1.1 Optimasi Model Geometri Jumlah Monomer Acrylic Acid

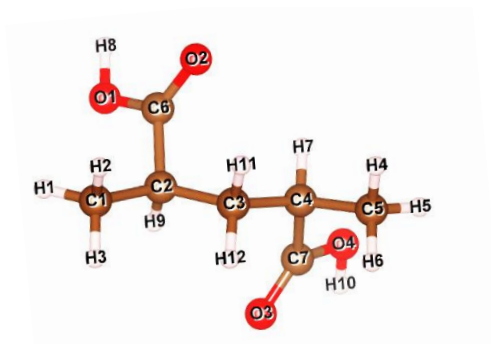
Model geometri dalam penelitian ini dibangun untuk merepresentasikan struktur acrylic acid pada tingkat atomistik sebagai dasar analisis radiolisis. Struktur yang digunakan meliputi monomer acrylic acid, dimer acrylic acid, dan trimer acrylic acid untuk menggambarkan pengaruh penambahan jumlah unit monomer terhadap kestabilan dan distribusi elektron secara lebih komprehensif.

Setelah model awal dibangun, dilakukan proses optimasi geometri menggunakan metode berbasis *Density Functional Theory* (DFT) untuk memperoleh geometri model jumlah monomer acrylic acid yang memiliki energi paling rendah. Optimasi ini bertujuan untuk memastikan bahwa gaya antar atom berada pada kondisi minimum sehingga geometri yang digunakan dalam simulasi merepresentasikan keadaan kesetimbangan sistem. Model geometri yang telah dioptimasi kemudian digunakan sebagai input dalam simulasi lanjutan, termasuk analisis kerapatan elektron dan simulasi *molecular dynamic* menggunakan metode *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD), guna mengkaji perubahan struktur akibat proses ionisasi dan radiolisis.

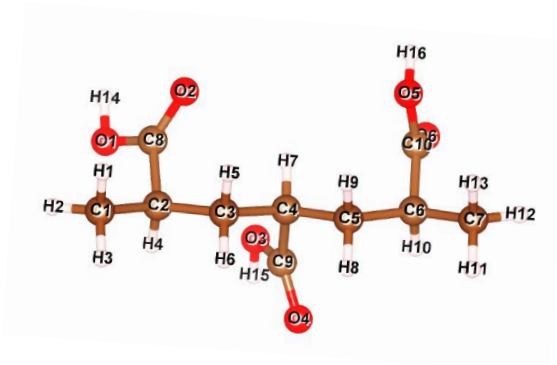
 Carbon
 Hydrogen
 Oxygen



Gambar 4.1 Hasil optimasi geometri monomer acrylic acid menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dihitung menggunakan ORCA 6.0.0.



Gambar 4.3 Hasil optimasi geometri dimer acrylic acid menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dihitung menggunakan ORCA 6.0.0.



Gambar 4.2 Hasil optimasi geometri trimer acrylic acid menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** yang dihitung menggunakan ORCA 6.0.0.

Gambar 4.1–4.3 menunjukkan hasil geometri model jumlah monomer acrylic acid yang telah dioptimasi menggunakan metode DFT pada tingkat teori CAM-B3LYP/6-311++G**. Hasil optimasi geometri selanjutnya digunakan untuk memperoleh nilai panjang ikatan C–C, O–H, C–H, C–O, dan C=O yang disajikan pada Tabel 4.1.

Tabel 4.1 Panjang ikatan C–C, O–H, C–H, C–O, dan C=O yang diperoleh dari hasil optimasi geometri DFT pada monomer, dimer, dan trimer acrylic acid.

Jenis Ikatan	Monomer Acrylic acid (Å)	Dimer Acrylic acid (Å)	Trimer Acrylic acid (Å)	Nilai Referensi (Å) (Zhang et al, 2019)
C1–C2	1,51	-	-	1,52
O2–H8	0,96	-	-	0,96
C2–H1	1,09	-	-	1,09
C4–O1	1,34	-	-	1,35
C4=O2	1,21	-	-	1,22
C2–C6	-	1,51	-	-
O1–H8	-	0,96	-	-
C1–H1	-	1,09	-	-
C6–O1	-	1,34	-	-
C6=O2	-	1,21	-	-
C2–C8	-	-	1,51	-
O1–H14	-	-	0,96	-
C1–H1	-	-	1,09	-
C8–O1	-	-	1,34	-
C8=O2	-	-	1,21	-

Nilai panjang ikatan hasil optimasi geometri pada monomer, dimer, dan trimer acrylic acid disajikan pada Tabel 4.1. Berdasarkan hasil perhitungan, panjang ikatan C–C, O–H, C–H, C–O, dan C=O pada monomer acrylic acid berturut-turut sebesar 1,51 Å; 0,96 Å; 1,09 Å; 1,34 Å; dan 1,21 Å. Nilai tersebut menunjukkan

kesesuaian dengan data referensi yang dilaporkan oleh Zhang *et al.* (2019), sehingga struktur hasil optimasi dapat digunakan untuk analisis pada tahap selanjutnya. Hasil optimasi geometri pada dimer acrylic acid dan trimer acrylic acid juga menunjukkan hasil Panjang ikatan yang relatif serupa dengan monomer, mengindikasikan bahwa penambahan unit monomer tidak menyebabkan perubahan yang signifikan terhadap parameter panjang ikatan.

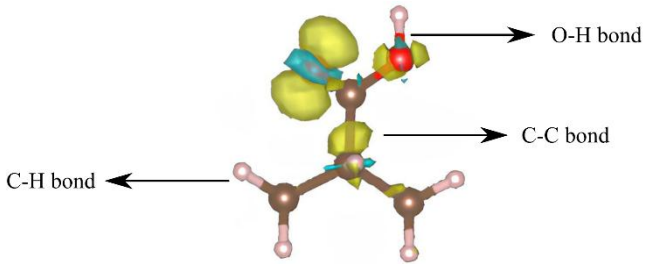
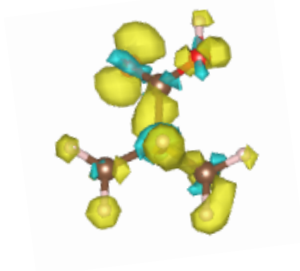
4.1.2 Distribusi Kerapatan Elektron pada Jumlah Monomer Acrylic Acid ($m = 1-3$)

Distribusi kerapatan elektron pada sistem acrylic acid dianalisis untuk memahami pengaruh ionisasi terhadap stabilitas ikatan kimia dalam molekul. Perhitungan dilakukan dengan membandingkan distribusi kerapatan elektron antara keadaan netral dan keadaan terionisasi, yaitu +1, +2, dan +3, menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan pendekatan CAM-B3LYP/6-311++G**. Analisis distribusi (kerapatan elektron) *electron density* ini dilakukan untuk mendeteksi bagian molekul yang mengalami perubahan distribusi elektron paling signifikan akibat ionisasi, sehingga dapat diprediksi daerah yang paling berpotensi mengalami pelemahan maupun pemutusan ikatan kimia selama proses radiolisis.

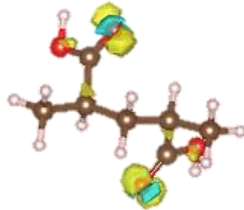
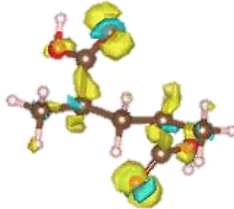
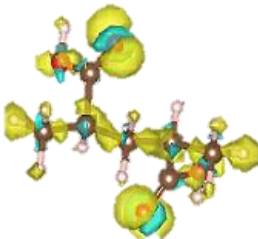
Proses ionisasi pada molekul monomer acrylic acid menyebabkan pola distribusi kerapatan elektron yang dapat diamati melalui visualisasi *electron density*. Dalam visualisasi tersebut, warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron akibat pelepasan elektron selama proses ionisasi, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron. Pola distribusi densitas elektron paling dominan terjadi pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$), terutama di sekitar atom oksigen dan ikatan O–H, yang mengindikasikan bahwa gugus tersebut merupakan lokasi paling sensitif terhadap paparan radiasi gamma. Pada

ionisasi +1, penurunan densitas elektron masih terlokalisasi di sekitar gugus karboksil sehingga struktur molekul relatif stabil. Ketika ionisasi meningkat menjadi +2, pola distribusi elektron mulai menyebar ke rantai karbon utama dan menunjukkan berkurangnya kestabilan ikatan C–C. Hasil visualisasi untuk setiap tingkat ionisasi disajikan pada Tabel 4.2.

Tabel 4.2 Pola distribusi kerapatan elektron pada monomer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi yang diperoleh dari perhitungan DFT menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** dengan perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron akibat ionisasi.

Ionisasi	Pola Distribusi Kerapatan Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	

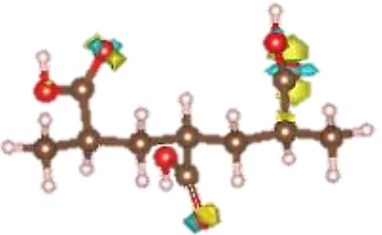
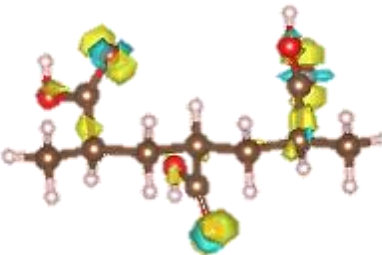
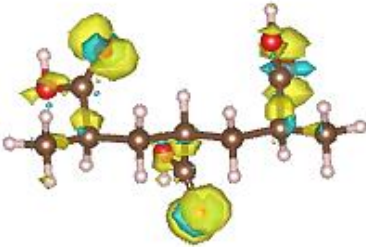
Tabel 4.3 Pola distribusi kerapatan elektron pada dimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi yang diperoleh dari perhitungan DFT menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** dengan perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron akibat ionisasi.

Ionisasi	Pola Distribusi Kerapatan Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +4	

Tabel 4.3 menampilkan pola distribusi kerapatan elektron pada dimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi. Pada ionisasi +1, pola distribusi kerapatan elektron terlihat terlokalisasi di sekitar gugus karboksil ($-\text{COOH}$) dengan daerah penurunan kerapatan elektron (kuning) yang masih terbatas. Pada ionisasi +2, daerah kuning meluas secara signifikan dan mulai mencakup kedua unit monomer penyusun dimer, menunjukkan bahwa pelepasan elektron lebih lanjut memperbesar wilayah penurunan kerapatan elektron. Pada ionisasi +4, penurunan kerapatan elektron semakin meluas dan merata di seluruh bagian molekul dimer,

termasuk pada daerah ikatan C–C dan kedua gugus karboksil, serta mulai terlihat akumulasi kerapatan elektron (biru) di beberapa titik pada rantai karbon.

Tabel 4. 4 Pola distribusi kerapatan elektron pada trimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi yang diperoleh dari perhitungan DFT menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** dengan perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna kuning menunjukkan daerah penurunan kerapatan elektron, sedangkan warna biru menunjukkan daerah akumulasi kerapatan elektron akibat ionisasi.

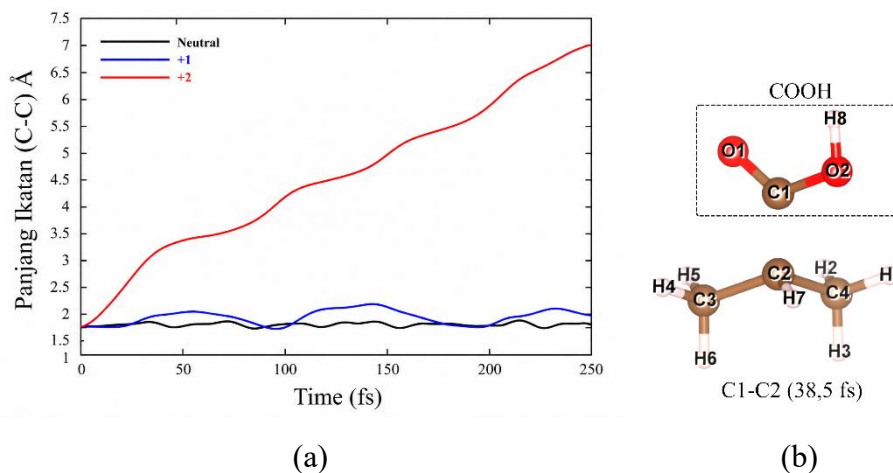
Ionisasi	Pola Distribusi Kerapatan Elektron
Netral dan +1	
Netral dan +2	
Netral dan +6	

Tabel 4.4 menampilkan pola distribusi kerapatan elektron pada trimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi. Pada ionisasi +1, pola distribusi kerapatan elektron hanya terlihat pada beberapa titik terlokalisasi di sekitar gugus karboksil, dengan dominasi warna kuning yang masih terbatas. Pada ionisasi +2, daerah penurunan kerapatan elektron (kuning) meluas secara signifikan dan mulai menyebar ke beberapa gugus karboksil sekaligus di sepanjang rantai trimer. Pada ionisasi +6, penurunan kerapatan elektron semakin meluas dan tersebar merata di seluruh rantai molekul, termasuk pada daerah ikatan C–C dan gugus karboksil di ketiga unit monomer penyusun trimer.

4.1.3 Mekanisme Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Jumlah Monomer Acrylic Acid

Simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) digunakan untuk mengamati bagaimana struktur acrylic acid berubah secara langsung ketika mengalami ionisasi. Berbeda dengan metode DFT yang hanya menganalisis struktur molekul dalam keadaan diam, AIMD memungkinkan pengamatan pergerakan atom dan perubahan panjang ikatan dari waktu ke waktu, sehingga proses pemutusan ikatan dapat diidentifikasi secara lebih detail pada skala atomik.

4.1.3.1 Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Monomer Acrylic Acid dalam Keadaan Netral dan Bermuatan

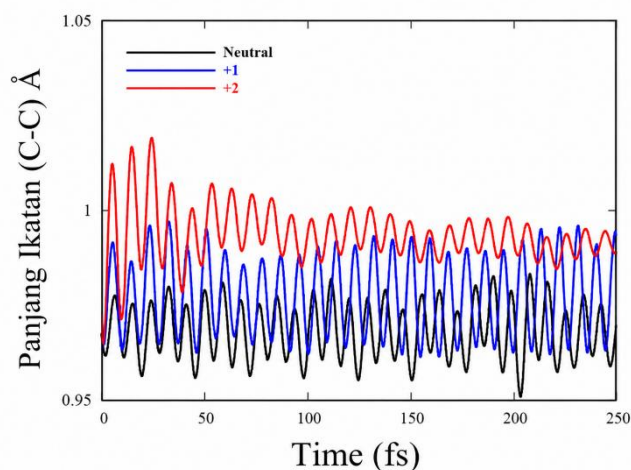


Gambar 4.4 (a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada monomer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C1–C2 pada kondisi ionisasi +2 pada waktu 38,5 fs.

Gambar 4.4 (a) menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan C–C pada monomer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan ionisasi +2 selama 250 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili keadaan netral menunjukkan panjang ikatan C–C berfluktuasi stabil pada rentang sekitar 1,5 Å sepanjang simulasi. Garis biru yang mewakili ionisasi +1 juga menunjukkan pola yang serupa, dengan panjang ikatan yang relatif stabil tanpa perubahan signifikan. Sementara itu, garis merah yang mewakili ionisasi +2 menunjukkan peningkatan panjang ikatan C–C secara bertahap sejak awal simulasi hingga mencapai lebih dari 7 Å pada akhir simulasi 250 fs.

Gambar 4.4 (b) menampilkan visualisasi geometri 1-AA pada saat disosiasi ikatan C1–C2 terjadi, yaitu pada waktu 38,5 fs dalam kondisi ionisasi +2. Terlihat bahwa atom C1 dan C2 mulai terpisah dari rantai utama polimer yang ditandai dengan

merenggangnya jarak antar atom pada posisi tersebut, mengkonfirmasi bahwa pemutusan ikatan C–C berlangsung secara nyata pada skala waktu femtosecond akibat proses ionisasi.



Gambar 4.5 Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada monomer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0.

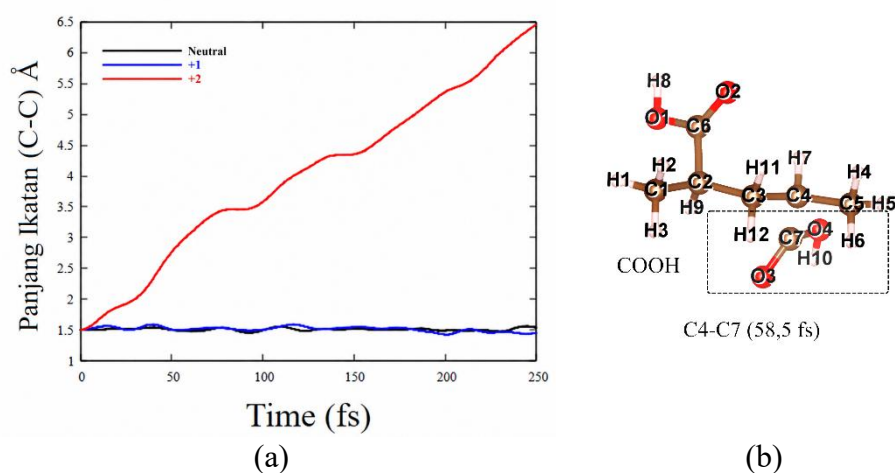
Gambar 4.5 menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan O–H pada monomer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan ionisasi +2 selama 250 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili keadaan netral menunjukkan panjang ikatan O–H berfluktuasi secara periodik pada rentang sekitar 0,95–1,00 Å sepanjang simulasi. Garis biru yang mewakili ionisasi +1 menunjukkan pola fluktuasi yang serupa dengan keadaan netral, namun dengan amplitudo yang sedikit lebih besar. Garis merah yang mewakili ionisasi +2 menunjukkan fluktuasi dengan amplitudo paling besar di antara ketiga keadaan, dengan panjang ikatan O–H mencapai hingga sekitar 1,05 Å, namun ikatan O–H tidak mengalami pemutusan sepanjang 250 fs simulasi. Data waktu disosiasi secara lengkap disajikan pada tabel 4. 5.

Tabel 4. 5 Waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada monomer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi berdasarkan hasil simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Tanda (–) menunjukkan bahwa ikatan tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung.

Ionisasi	Timer (fs)	
	O–H	C–C
Netral	-	-
+1	-	-
+2 (C1-C2)	-	38,5

Tabel 4.5 menampilkan waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada monomer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi. Pada keadaan netral dan ionisasi +1, baik ikatan O–H maupun ikatan C–C tidak mengalami pemutusan sepanjang 250 fs simulasi berlangsung, yang ditandai dengan tanda (–) pada kedua kolom. Pemutusan ikatan C–C pertama kali teramati pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 38,5 fs, sementara ikatan O–H tetap tidak terputus.

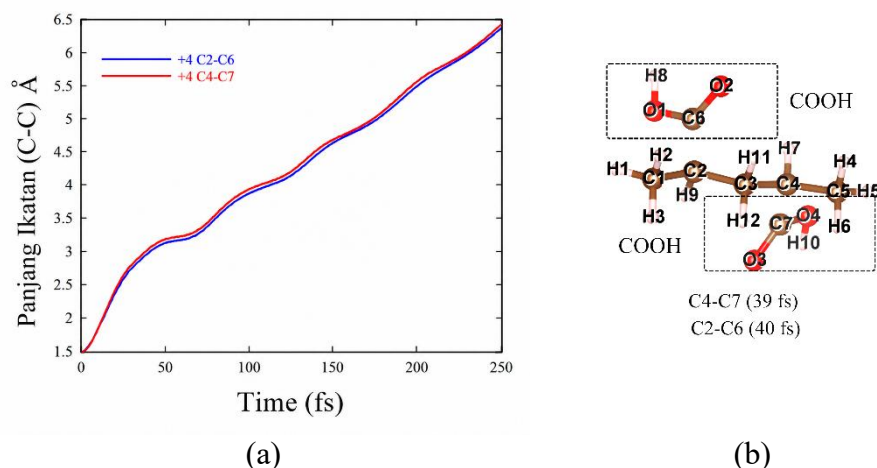
4.1.3.2 Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Dimer Acrylic Acid dalam Keadaan Netral dan Bermuatan



Gambar 4. 6 (a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C1–C2 pada kondisi ionisasi +2.

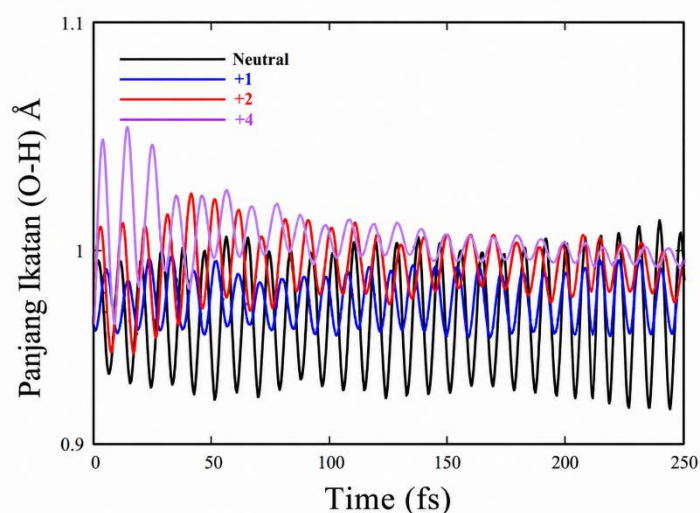
Gambar 4.6 (a) menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan ionisasi +2 selama 250 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili keadaan netral menunjukkan panjang ikatan C–C berfluktuasi stabil pada rentang sekitar 1,5 Å sepanjang simulasi. Garis biru yang mewakili ionisasi +1 juga menunjukkan pola yang serupa, dengan panjang ikatan yang relatif stabil tanpa perubahan signifikan. Sementara itu, garis merah yang mewakili ionisasi +2 menunjukkan peningkatan panjang ikatan C–C secara bertahap sejak awal simulasi hingga mencapai lebih dari 6 Å pada akhir simulasi 250 fs.

Gambar 4.6 (b) menampilkan visualisasi geometri dimer AA pada saat disosiasi ikatan C4–C7 terjadi, yaitu pada waktu 58,5 fs dalam kondisi ionisasi +2. Terlihat bahwa atom C4 dan C7 mulai terpisah dari rantai utama polimer yang ditandai dengan merenggangnya jarak antar atom pada posisi tersebut, mengkonfirmasi bahwa pemutusan ikatan C–C berlangsung secara nyata pada skala waktu femtosecond akibat proses ionisasi, yang mengindikasikan kemungkinan terjadinya radiolisis pada struktur dimer AA.



Gambar 4.7 (a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +4 sebagai fungsi waktu simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna biru mendeskripsikan ikatan C2–C6, dan warna merah mendeskripsikan ikatan C4–C7. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C4–C10 serta C4–C7 pada kondisi ionisasi +4.

Gambar 4.7 (b) menampilkan visualisasi geometri dimer AA pada saat disosiasi ikatan C4–C7 terjadi pada waktu 39 fs, ikatan C2–C6 pada waktu 40 fs, serta ikatan C4–C7 pada kondisi ionisasi +4. Terlihat bahwa beberapa ikatan C–C terputus secara berurutan dalam rentang waktu yang sangat berdekatan, mengkonfirmasi bahwa peningkatan tingkat ionisasi mempercepat dan memperluas pemutusan ikatan C–C pada struktur dimer AA.



Gambar 4.8 Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada dimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, +2, dan +4 sebagai fungsi waktu simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0.

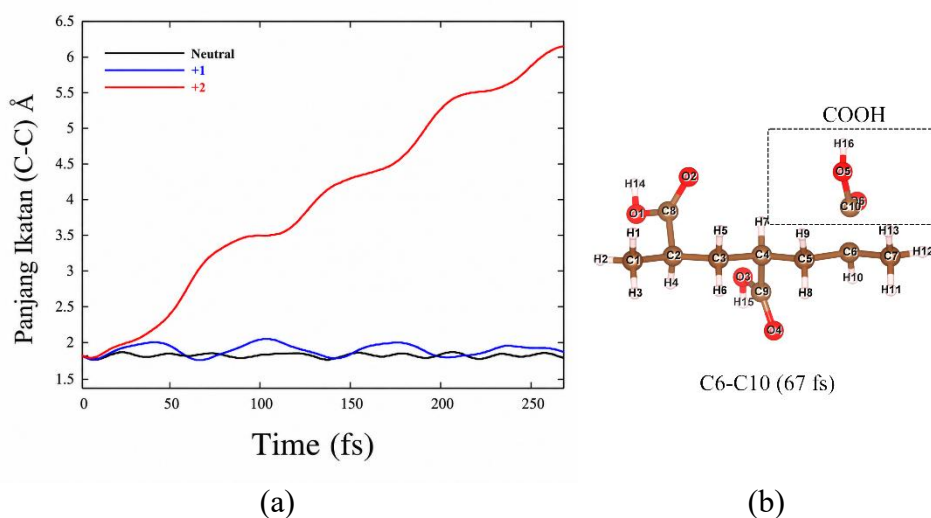
Gambar 4.8 menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan O–H pada dimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, +2, dan +4 selama 250 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili keadaan netral menunjukkan panjang ikatan O–H berfluktuasi secara periodik pada rentang sekitar 0,95–1,00 Å sepanjang simulasi. Garis biru yang mewakili ionisasi +1 menunjukkan pola fluktuasi yang serupa dengan keadaan netral. Garis merah yang mewakili ionisasi +2 menunjukkan fluktuasi dengan amplitudo yang lebih besar, terutama pada awal simulasi, namun ikatan O–H tetap tidak mengalami pemutusan. Garis yang mewakili ionisasi +4 menunjukkan amplitudo fluktuasi paling besar di antara keempat keadaan, dengan panjang ikatan O–H mencapai hingga sekitar 1,1 Å pada awal simulasi, namun ikatan O–H juga tidak mengalami pemutusan sepanjang 250 fs simulasi berlangsung. Data waktu disosiasi disajikan pada Tabel 4. 6.

Tabel 4. 6 Waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada dimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi berdasarkan hasil simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Tanda (–) menunjukkan bahwa ikatan tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung.

Ionisasi	Time (fs)	
	O–H	C–C
Netral	-	-
+1	-	-
+2 (C4-C7)	-	58,5
+4 (C4-C7)	-	39
+4 (C2-C6)	-	40

Tabel 4.6 menampilkan waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada dimer acrylic acid dalam berbagai keadaan ionisasi. Pada keadaan netral dan ionisasi +1, baik ikatan O–H maupun ikatan C–C tidak mengalami pemutusan sepanjang 250 fs simulasi berlangsung. Pada ionisasi +2, ikatan O–H tidak mengalami pemutusan, namun ikatan C4–C7 terputus pada waktu 58,5 fs. Pada ionisasi +4, pemutusan ikatan C–C terjadi pada dua ikatan sekaligus, yaitu ikatan C4–C7 yang terputus pada waktu 39 fs dan ikatan C2–C6 yang terputus pada waktu 40 fs, sedangkan ikatan O–H tetap tidak mengalami pemutusan.

4.1.3.3 Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Trimer Acrylic acid dalam Keadaan Netral dan Bermuatan

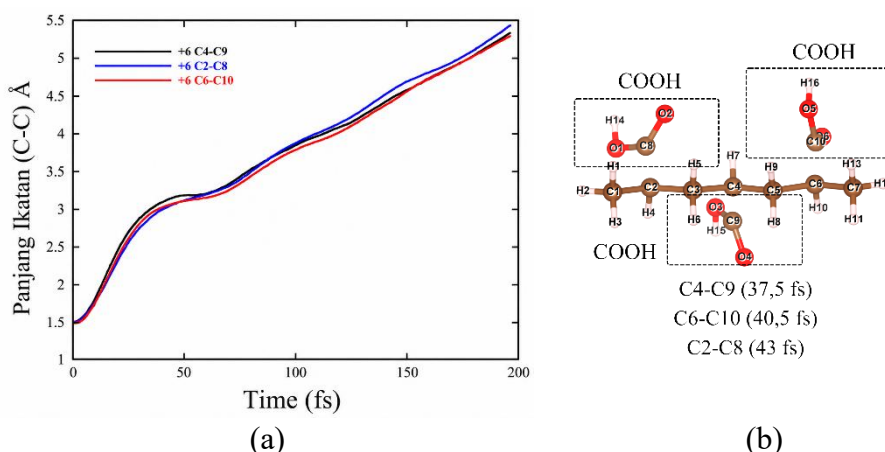


Gambar 4. 9 (a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada trimer acrylic acid dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan +2 sebagai fungsi waktu simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C6–C10 pada kondisi ionisasi +2.

Gambar 4.9 (a) menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan C–C pada trimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, dan ionisasi +2 selama 250 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili keadaan netral menunjukkan panjang ikatan C–C berfluktuasi stabil pada rentang sekitar 1,5 Å sepanjang simulasi. Garis biru yang mewakili ionisasi +1 juga menunjukkan pola yang serupa, dengan panjang ikatan yang relatif stabil tanpa perubahan signifikan. Sementara itu, garis merah yang mewakili ionisasi +2 menunjukkan peningkatan panjang ikatan C–C secara bertahap sejak awal simulasi hingga mencapai lebih dari 6 Å pada akhir simulasi 250 fs.

Gambar 4.9 (b) menampilkan visualisasi geometri trimer AA pada saat disosiasi ikatan C6–C10 terjadi, yaitu pada waktu 67 fs dalam kondisi ionisasi +2. Terlihat bahwa atom C6 dan C10 mulai terpisah dari rantai utama polimer yang ditandai dengan merenggangnya jarak antar atom pada posisi tersebut, mengkonfirmasi

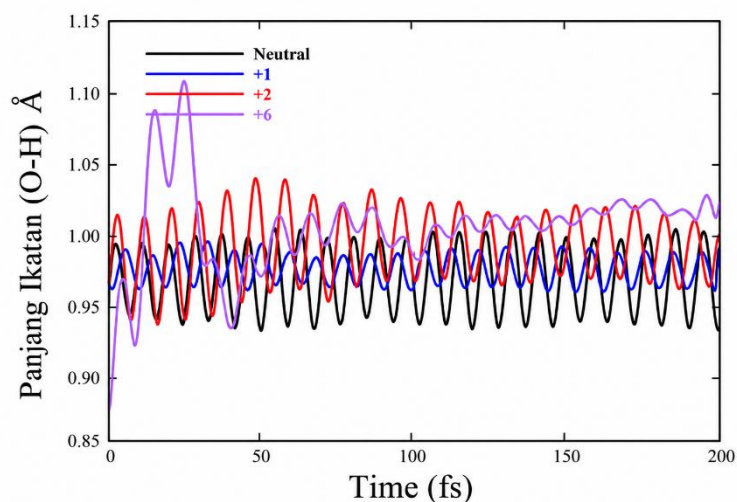
bahwa pemutusan ikatan C–C berlangsung secara nyata pada skala waktu femtosecond akibat proses ionisasi, yang mengindikasikan kemungkinan terjadinya radiolisis pada struktur trimer AA.



Gambar 4.10 (a) Grafik perubahan panjang ikatan C–C pada dimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +6 sebagai fungsi waktu simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Warna hitam mendeskripsikan ikatan C4–C9, warna biru mendeskripsikan ikatan C2–C8, dan warna merah mendeskripsikan ikatan C6–C10. (b) Visualisasi disosiasi ikatan C4–C10 serta C4–C7 pada kondisi ionisasi +6.

Gambar 4.10 (a) menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan C–C pada trimer *acrylic acid* dalam kondisi ionisasi +6 selama 200 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili ikatan C4–C9 menunjukkan peningkatan panjang ikatan secara bertahap hingga mencapai lebih dari 3,5 Å pada akhir simulasi. Garis biru yang mewakili ikatan C2–C8 menunjukkan pola peningkatan yang serupa dan hampir berhimpit dengan garis hitam sepanjang simulasi berlangsung. Garis merah yang mewakili ikatan C6–C10 juga menunjukkan pola peningkatan yang serupa dengan kedua ikatan tersebut.

Gambar 4.10 (b) menampilkan visualisasi geometri trimer AA pada saat disosiasi ikatan C4–C9 terjadi pada waktu 37,5 fs, ikatan C6–C10 pada waktu 40,5 fs, dan ikatan C2–C8 pada waktu 43 fs dalam kondisi ionisasi +6. Terlihat bahwa ketiga ikatan C–C terputus secara berurutan dalam rentang waktu yang sangat berdekatan, mengkonfirmasi bahwa peningkatan tingkat ionisasi hingga +6 mempercepat dan memperluas pemutusan ikatan C–C secara serentak pada seluruh rantai trimer AA.



Gambar 4.11 Grafik perubahan panjang ikatan O–H pada trimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, +2, dan +6 sebagai fungsi waktu simulasi *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD) menggunakan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0.

Gambar 4.11 menunjukkan grafik perubahan panjang ikatan O–H pada trimer *acrylic acid* dalam keadaan netral, ionisasi +1, +2, dan +6 selama 200 fs waktu simulasi. Garis hitam yang mewakili keadaan netral menunjukkan panjang ikatan O–H berfluktuasi secara periodik pada rentang sekitar 0,95–1,00 Å sepanjang simulasi. Garis biru yang mewakili ionisasi +1 menunjukkan pola fluktuasi yang serupa dengan keadaan netral. Garis merah yang mewakili ionisasi +2 menunjukkan fluktuasi dengan amplitudo yang lebih besar dibandingkan keadaan netral dan ionisasi +1. Sementara itu, garis ungu yang mewakili ionisasi +6 menunjukkan amplitudo fluktuasi paling besar di antara keempat keadaan,

dengan panjang ikatan O–H mencapai hingga sekitar 1,15 Å pada awal simulasi, namun ikatan O–H tidak mengalami pemutusan sepanjang 200 fs simulasi berlangsung.

Tabel 4.7 Waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada trimer *acrylic acid* dalam berbagai keadaan ionisasi berdasarkan hasil simulasi Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) menggunakan metode DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G** pada perangkat lunak ORCA 6.0.0. Tanda (–) menunjukkan bahwa ikatan tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung.

Ionisasi	Time (fs)	
	O-H	C-C
Netral	-	-
+1	-	-
+2 (C6-C10)	-	67
+6 (C4-C9)	-	37,5
+6 (C6-C10)	-	40,5
+6 (C2-C8)	-	43

Tabel 4.7 menampilkan waktu disosiasi ikatan O–H dan C–C pada trimer *acrylic acid* dalam berbagai keadaan ionisasi. Pada keadaan netral dan ionisasi +1, baik ikatan O–H maupun ikatan C–C tidak mengalami pemutusan sepanjang simulasi berlangsung. Pada ionisasi +2, ikatan O–H tidak mengalami pemutusan, namun ikatan C6–C10 terputus pada waktu 67 fs. Pada ionisasi +6, pemutusan ikatan C–C terjadi pada tiga ikatan sekaligus, yaitu ikatan C4–C9 yang terputus pada waktu 37,5 fs, ikatan C6–C10 pada waktu 40,5 fs, dan ikatan C2–C8 pada waktu 43 fs.

4.2 Pembahasan

4.2.1 Optimasi Geometri Polimer Acrylic Acid

Optimasi geometri dilakukan melalui proses iterasi berulang hingga geometri model acrylic acid mencapai konfigurasi dengan energi paling rendah. Pada tahap awal, model monomer, dimer, dan trimer acrylic acid dirancang secara komputasional berdasarkan konfigurasi awal sehingga geometrinya belum mencerminkan kondisi kesetimbangan molekul. Selama proses optimasi, perangkat lunak ORCA 6.0.0 menghitung energi sistem secara berulang pada setiap iterasi, geometri molekul termasuk panjang ikatan tiap atom terus diperbaiki hingga mencapai geometri kesetimbangan. Proses iterasi dinyatakan konvergen ketika energi sistem telah mencapai titik energi minimum. Pada kondisi ini, susunan atom dan panjang ikatan yang diperoleh mencerminkan geometri kesetimbangan dari masing-masing model acrylic acid.

Meskipun optimasi geometri menghasilkan parameter ikatan secara menyeluruh pada seluruh atom penyusun molekul, penelitian ini memfokuskan analisis pada gugus karboksil (-COOH) sebagai gugus fungsional utama yang paling reaktif secara kimiawi dalam molekul acrylic acid. Oleh karena itu, parameter geometri yang dikaji secara mendalam dalam penelitian ini yaitu panjang ikatan C–C pada rantai karbon utama dan ikatan O–H pada gugus karboksil, meskipun hasil optimasi juga menghasilkan parameter panjang ikatan lainnya seperti ikatan C–H, C–O, dan C=O.

Hasil optimasi geometri pada tabel 4.1 menunjukkan bahwa panjang ikatan C–C dan O–H pada ketiga model acrylic acid masing-masing sebesar 1,51 Å dan 0,96 Å. Nilai ini sesuai dengan panjang ikatan yang umumnya ditemukan pada

molekul asam organik bergugus karboksil ($-\text{COOH}$), yang menandakan bahwa hasil optimasi tidak menyimpang dari sifat kimia molekul tersebut.

Kesesuaian ini juga diperkuat oleh penelitian Zhang et al. (2019), yang menemukan panjang ikatan C–C sebesar 1,527 Å dan O–H sebesar 0,967 Å pada acrylic acid melalui perhitungan DFT dengan basis set 6-311++G(2d,2p). Mengingat selisih antara kedua hasil tersebut sangat kecil, dapat disimpulkan bahwa optimasi geometri dalam penelitian ini menghasilkan struktur molekul yang valid dan dapat diandalkan untuk tahap analisis selanjutnya.

Konsistensi panjang ikatan C–C dan O–H pada ketiga model dapat dijelaskan melalui prinsip dasar kimia komputasi, yaitu bahwa panjang ikatan kovalen ditentukan oleh interaksi elektronik lokal antara dua atom yang berikatan, bukan oleh panjang keseluruhan rantai polimer. Ikatan C–C pada rantai karbon *acrylic acid* merupakan ikatan tunggal (*single bond*) dengan karakter ikatan sigma (σ) yang bersifat terlokalisasi di antara dua atom karbon yang berdekatan. Penambahan unit monomer pada rantai tidak mengubah sifat elektronik lokal ikatan C–C secara signifikan karena setiap ikatan C–C tetap dikelilingi oleh lingkungan elektronik yang serupa, yaitu atom karbon yang terikat pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$) dan hidrogen. Hal ini konsisten dengan konsep *transferability* dalam kimia kuantum, yang menyatakan bahwa parameter geometri ikatan cenderung tidak berubah secara signifikan ketika unit yang sama diulang dalam rantai polimer yang lebih panjang (Jeong et al., 2019)

Demikian pula untuk ikatan O–H pada gugus karboksil, konsistensi panjang ikatan sebesar 0,96 Å pada ketiga model menunjukkan bahwa gugus $-\text{COOH}$ bersifat relatif independen secara elektronik terhadap panjang rantai polimer. Gugus

karboksil memiliki distribusi elektron yang stabil akibat resonansi antara ikatan C=O dan C–O, sehingga ikatan O–H tidak terpengaruh secara signifikan oleh penambahan unit monomer. Kondisi ini selaras dengan temuan Kim et al. (2021) yang menyatakan bahwa gugus karboksil (–COOH) dalam struktur *acrylic acid* mempertahankan geometri lokalnya secara konsisten dalam berbagai panjang rantai polimer.

Secara keseluruhan, konsistensi parameter geometri lokal pada ketiga model mengkonfirmasi bahwa pertambahan jumlah unit monomer tidak mengubah karakteristik ikatan C–C maupun O–H secara signifikan, meskipun memengaruhi kestabilan struktur dan distribusi elektron secara global. Dengan demikian, ketiga model dinyatakan layak digunakan untuk tahap simulasi selanjutnya.

4.2.2 Distribusi Kerapatan Elektron pada Jumlah Monomer Acrylic Acid (m = 1-3)

Analisis kerapatan elektron (*electron density*) digunakan untuk mendeteksi ikatan mana yang paling berpotensi mengalami pemutusan akibat proses radiolisis. Prinsip dasarnya yaitu kestabilan suatu ikatan kimia sangat bergantung pada kepadatan elektron ikat di antara dua atom yang berikatan. Ketika molekul mengalami ionisasi akibat paparan radiasi gamma, sejumlah elektron terlepas dari sistem sehingga distribusi kerapatan elektron mengalami perubahan. Daerah yang mengalami penurunan kerapatan elektron paling besar merupakan indikator awal lokasi ikatan yang paling rentan mengalami pemutusan, karena berkurangnya elektron ikat pada suatu posisi secara langsung melemahkan gaya tarik antara inti-inti atom yang berikatan di posisi tersebut. Dengan demikian, peta distribusi kerapatan elektron dapat digunakan sebagai prediktor awal pemutusan ikatan.

Perhitungan dilakukan dengan membandingkan distribusi kerapatan elektron antara keadaan netral dan keadaan terionisasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan pendekatan CAM-B3LYP/6-311++G**. Sebagaimana ditegaskan oleh Allen (2017), deposisi energi akibat radiasi pengion terjadi secara proporsional terhadap kerapatan elektron lokal dalam atom-atom substrat yang diiradiasi, sehingga pola distribusi elektron menjadi indikator untuk memahami mekanisme degradasi polimer akibat radiasi gamma.

Berdasarkan tabel 4.2-4.4, hasil pola distribusi kerapatan elektron pada ketika model acrylic acid secara konsisten menunjukkan bahwa gugus karboksil ($-\text{COOH}$) merupakan lokasi paling sensitif terhadap ionisasi. Distribusi elektron yang terkonsentrasi pada gugus $-\text{COOH}$ menjadikannya target utama penyerapan energi radiasi ketika molekul terpapar radiasi gamma, sebagaimana ditegaskan oleh (Allen et al., 2017) bahwa penyerapan energi radiasi akibat radiasi pengion terjadi secara proporsional terhadap kerapatan elektron lokal dalam atom-atom substrat yang diiradiasi.

Kerentanan gugus karboksil ($-\text{COOH}$) terhadap ionisasi dapat dijelaskan berdasarkan karakteristik elektroniknya. Gugus ini mengandung dua atom oksigen yang memiliki elektronegativitas tinggi sehingga menarik dan mengakumulasi kerapatan elektron di sekitarnya. Selain itu, atom oksigen juga memiliki pasangan elektron bebas yang relatif lebih mudah mengalami eksitasi atau pelepasan elektron dibandingkan elektron yang terikat kuat dalam ikatan σ . Akibatnya, ketika molekul acrylic acid terpapar radiasi gamma, gugus $-\text{COOH}$ menjadi lokasi yang paling mudah mengalami gangguan distribusi elektron dan menjadi pusat awal terjadinya ionisasi. Temuan ini sejalan dengan hasil distribusi kerapatan elektron yang

menunjukkan bahwa penurunan densitas elektron pertama kali terlokalisasi pada gugus karboksil pada seluruh model yang dikaji.

Meskipun demikian, hasil analisis menunjukkan bahwa pada tingkat ionisasi yang lebih tinggi, penurunan kerapatan elektron tidak lagi hanya terlokalisasi pada gugus -COOH , tetapi mulai meluas ke sepanjang rantai karbon utama, terutama pada ikatan C-C . Fenomena ini menunjukkan adanya perbedaan antara lokasi yang paling mudah mengalami ionisasi dengan lokasi yang berpotensi mengalami pelemahan ikatan. Gugus -COOH berperan sebagai pusat ionisasi awal karena memiliki kerapatan elektron yang tinggi dan pasangan elektron bebas yang mudah terganggu oleh radiasi. Sebaliknya, penurunan kerapatan elektron pada ikatan C-C merupakan konsekuensi lanjutan dari proses redistribusi muatan setelah ionisasi terjadi.

Ketika elektron terlepas dari gugus karboksil, terbentuk keadaan kation radikal yang tidak stabil. Untuk mencapai kondisi yang lebih stabil, sistem molekul melakukan redistribusi densitas elektron ke seluruh struktur melalui proses delokalisasi muatan. Akibatnya, kekurangan elektron yang semula terpusat pada gugus -COOH mulai menyebar ke bagian lain molekul, termasuk ikatan C-C pada rantai utama. Semakin tinggi tingkat ionisasi, semakin besar gangguan distribusi elektron yang terjadi sehingga area penurunan kerapatan elektron menjadi semakin luas.

Penyebaran penurunan kerapatan elektron ke ikatan C-C memiliki implikasi penting terhadap mekanisme radiolisis. Kestabilan ikatan kovalen sangat bergantung pada keberadaan elektron ikat di antara dua inti atom yang berikatan. Oleh karena itu, berkurangnya kerapatan elektron pada daerah antarinti karbon

menyebabkan melemahnya ikatan σ C–C dan meningkatkan kemungkinan terjadinya pemutusan rantai. Dengan demikian, gugus –COOH dapat dipandang sebagai lokasi inisiasi ionisasi, sedangkan ikatan C–C merupakan lokasi yang kemudian menjadi rentan terhadap pemutusan akibat redistribusi kerapatan elektron yang terjadi setelah proses ionisasi berlangsung.

Pada ionisasi +1 di ketiga model, penurunan kerapatan elektron masih terlokalisasi di sekitar gugus –COOH. Terlokalisasinya penurunan kerapatan elektron pada gugus karboksil ini mengindikasikan bahwa pelepasan satu elektron belum cukup untuk mengganggu keseimbangan distribusi elektron pada rantai karbon utama. Gugus –COOH pada kondisi ini bertindak sebagai penyangga pertama yang menyerap gangguan ionisasi, sehingga struktur molekul pada ketiga model masih relatif stabil pada ionisasi rendah.

Ketika ionisasi meningkat, daerah penurunan kerapatan elektron meluas secara signifikan dari gugus karboksil ke sepanjang rantai karbon utama, dengan pola perluasan yang semakin kompleks seiring bertambahnya jumlah unit monomer. Pada 1-AA, perluasan ini mulai teramati pada ionisasi +2. Pada 2-AA, perluasan yang serupa juga teramati pada ionisasi +2, namun dengan cakupan yang lebih luas akibat adanya dua unit gugus karboksil, dan semakin masif pada ionisasi +4 hingga mencakup hampir seluruh struktur dimer. Pada 3-AA, distribusi kerapatan elektron yang paling luas dan kompleks teramati pada ionisasi +6, di mana hampir seluruh segmen rantai polimer mengalami gangguan distribusi elektron yang signifikan.

Perluasan penurunan kerapatan elektron ke ikatan C–C pada rantai karbon utama ini memiliki implikasi langsung terhadap potensi pemutusan ikatan.

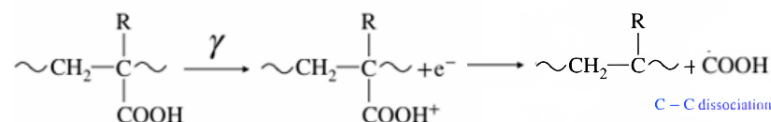
Berkurangnya kerapatan elektron pada ikatan C–C secara langsung memperlemah gaya tarik ikatan sigma (σ) antara atom-atom karbon, sebab kestabilan ikatan kovalen sangat bergantung pada kepadatan elektron ikat di antara dua inti atom yang berikatan. Melemahnya kerapatan elektron ikat inilah yang meningkatkan potensi pemutusan ikatan C–C dan menjadi pemicu awal mekanisme radiolisis pada rantai polimer acrylic acid.

Secara keseluruhan, analisis pola distribusi kerapatan elektron pada ketiga model memperlihatkan dua implikasi penting. Pertama, gugus –COOH bersifat sangat sensitif terhadap radiasi gamma karena kerapatan elektronnya yang tinggi menjadikannya lokasi utama penurunan kerapatan elektron sejak ionisasi awal. Kedua, hubungan antara penurunan kerapatan elektron dan potensi pemutusan ikatan bersifat progresif, semakin tinggi tingkat ionisasi, semakin luas area penurunan kerapatan elektron yang menjangkau ikatan C–C, dan semakin besar kemungkinan terjadinya pemutusan rantai polimer. Temuan ini secara teoritis konsisten dengan mekanisme radiolisis polimer akibat radiasi gamma yang dikemukakan oleh (Bhattacharya, 2012) yang menyatakan bahwa inisiasi kerusakan polimer dimulai dari destabilisasi distribusi elektron pada gugus karboksil.

4.2.3 Mekanisme Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Jumlah Monomer Acrylic Acid

Pemahaman mengenai mekanisme radiolisis acrylic acid memiliki relevansi langsung terhadap pengembangannya sebagai material *Drug Delivery System* (DDS). Dalam aplikasi DDS, acrylic acid dimanfaatkan sebagai *carrier* obat melalui pembentukan jaringan *crosslink* yang terjadi akibat paparan radiasi gamma.

Jaringan *crosslink* inilah yang berperan dalam menjebak dan melepaskan molekul obat secara terkontrol di dalam tubuh.



Gambar 4.12 Mekanisme radiolisis acrylic acid akibat paparan radiasi gamma berdasarkan hasil simulasi DFT-AIMD CAM-B3LYP/6-311++G* menggunakan ORCA 6.0.0, menunjukkan proses ionisasi yang secara langsung menyebabkan pemutusan ikatan C-C.

Proses radiolisis pada acrylic acid berlangsung melalui serangkaian tahapan yang saling berkaitan. Ketika molekul acrylic acid dikenai radiasi gamma, energi foton gamma diserap oleh sistem molekul melalui mekanisme efek compton sehingga memicu ionisasi. Akibat ionisasi tersebut, sejumlah elektron terlepas dari sistem dan menyebabkan penurunan kerapatan elektron pada ikatan-ikatan kimia dalam molekul. Penurunan kerapatan elektron inilah yang secara progresif melemahkan gaya Tarik antar atom, hingga pada tingkat ionisasi tertentu ikatan kimia tidak mampu lagi dipertahankan dan terjadilah pemutusan ikatan atau radiolisis. Berdasarkan analisis pola distribusi kerapatan elektron yang telah dilakukan, penurunan kerapatan elektron paling signifikan teramati pada ikatan C-C pada rantai utama, sehingga ikatan C-C menjadi kandidat utama yang diprediksi akan mengalami pemutusan ikatan dalam proses radiolisis.

Dalam menganalisis hasil simulasi AIMD, diperlukan suatu kriteria kuantitatif untuk menentukan apakah suatu ikatan kovalen masih dalam keadaan utuh atau telah mengalami pemutusan pada suatu titik waktu tertentu. Penentuan kriteria ini penting karena dalam simulasi dinamika molekul, panjang ikatan tidak berubah secara diskrit, melainkan berubah secara kontinu seiring waktu akibat

pergerakan atom yang dipengaruhi oleh gaya antar atom pada setiap langkah simulasi. Oleh karena itu, perlu ditetapkan suatu nilai ambang batas panjang ikatan sebagai acuan untuk mengidentifikasi momen terjadinya pemutusan ikatan secara struktural.

Pada penelitian ini, ikatan dinyatakan telah putus apabila panjang ikatan C–C atau O–H mencapai atau melebihi jarak 3 Å. Penentuan nilai ini didasarkan pada batas maksimum panjang ikatan C–C yang masih dapat dikategorikan sebagai ikatan kovalen menurut literatur. (J. Korpela, et al. 2003) menyatakan bahwa berdasarkan pemodelan komputasional, belum ditemukan ikatan C–C langsung yang melebihi panjang 2,4 Å, sementara ikatan C–C yang mengalami peregangan ekstrem hingga sekitar 2,2 Å masih dapat dipertahankan dengan energi disosiasi ikatan (BDE) sebesar 15–25 kcal/mol. Hal ini menunjukkan bahwa di atas panjang 2,4 Å, karakter ikatan kovalen C–C secara fisik sudah tidak dapat dipertahankan, sehingga atom-atom yang terlibat dapat dianggap tidak lagi terikat satu sama lain.

Dengan demikian, jarak 3 Å yang digunakan sebagai kriteria dalam penelitian ini berada di atas batas maksimum tersebut, sehingga secara fungsional dapat dikategorikan sebagai kondisi ikatan telah terputus. Kriteria ini juga konsisten dengan pendekatan yang umum digunakan dalam analisis simulasi dinamika molekul, di mana suatu ikatan dianggap putus apabila jarak antar atom melampaui nilai cutoff tertentu yang ditentukan berdasarkan karakteristik fisik ikatan tersebut. Selain itu, jika dibandingkan dengan panjang ikatan kesetimbangan C–C sebesar 1,51 Å yang diperoleh dari hasil optimasi geometri, nilai 3 Å setara dengan peningkatan sekitar 99% dari panjang kesetimbangan, yang jauh melampaui ambang batas perubahan panjang ikatan sebesar 50% yang umumnya digunakan

sebagai indikator ketidakstabilan struktural dalam simulasi dinamika molekul (Joel et al., 2024).

Berdasarkan hasil simulasi AIMD, pemutusan ikatan C–C akibat ionisasi tidak hanya menghasilkan fragmen molekul, tetapi juga membentuk spesies radikal yang memiliki elektron tidak berpasangan. Radikal yang terbentuk merupakan pusat reaktif yang sangat mudah berinteraksi dengan radikal lain di sekitarnya. Pada sistem polimer acrylic acid, pembentukan radikal karbon (carbon-centered radical) menjadi tahap awal terjadinya reaksi lanjutan berupa rekombinasi antarrantai polimer. Ketika dua radikal karbon saling bertemu, keduanya dapat membentuk ikatan kovalen baru yang menghubungkan dua rantai polimer, sehingga menghasilkan struktur tiga dimensi yang dikenal sebagai cross-linking.

Pembentukan cross-link tersebut merupakan tahapan penting dalam pengembangan *Drug Delivery System* (DDS) berbasis poly(acrylic acid). DDS merupakan suatu sistem penghantaran obat yang dirancang untuk membawa, melindungi, dan melepaskan zat aktif secara terkontrol menuju lokasi target di dalam tubuh sehingga efektivitas terapi meningkat dan efek samping dapat diminimalkan. Pada material acrylic acid, jaringan cross-link yang terbentuk akibat rekombinasi radikal berfungsi sebagai matriks hidrogel yang mampu mengenkapsulasi molekul obat di dalam jaringan polimer.

Hasil simulasi pada penelitian ini menunjukkan bahwa radiasi gamma menyebabkan ionisasi yang memicu pemutusan ikatan C–C, sedangkan gugus karboksil (–COOH) tetap dipertahankan. Terbentuknya radikal karbon setelah proses chain scission membuka peluang terjadinya reaksi rekombinasi yang menghasilkan cross-linking, sementara tetap utuhnya gugus –COOH

mempertahankan sifat hidrofilik, bioadhesif, dan responsif terhadap pH yang merupakan karakter utama acrylic acid sebagai material DDS. Dengan demikian, mekanisme radiolisis yang diperoleh dalam penelitian ini memberikan dasar molekuler bahwa paparan radiasi gamma tidak hanya menyebabkan perubahan struktur acrylic acid, tetapi juga menghasilkan spesies radikal yang selanjutnya memungkinkan pembentukan jaringan polimer yang sesuai untuk aplikasi penghantaran obat secara terkontrol.

4.2.3.1 Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Monomer Acrylic Acid dalam Keadaan Netral dan Bermuatan

Hasil pemutusan ikatan C–C dan O–H pada monomer acrylic acid (1-AA) dalam berbagai kondisi ionisasi ditunjukkan pada Tabel 4.5. Berdasarkan tabel tersebut, terlihat bahwa pada kondisi netral dan ionisasi +1, baik ikatan C–C maupun ikatan O–H tidak mengalami pemutusan selama 250 fs simulasi berlangsung. Pemutusan ikatan pertama kali teramati pada ionisasi +2, di mana ikatan C–C mengalami disosiasi pada waktu 38,5 fs, sementara ikatan O–H pada seluruh kondisi ionisasi konsisten tidak mengalami pemutusan. Pola ini menunjukkan bahwa terdapat ambang batas ionisasi yang menentukan kestabilan struktural monomer acrylic acid, di mana ionisasi +2 merupakan kondisi minimum yang mampu memicu pemutusan ikatan C–C pada rantai karbon utama.

Pada kondisi netral dan ionisasi +1, kerapatan elektron ikat pada ikatan C–C masih cukup untuk mempertahankan kestabilan struktural rantai karbon utama 1-AA sehingga tidak teramati pemutusan ikatan selama simulasi berlangsung. Kondisi ini konsisten dengan hasil analisis *electron density difference* pada subbab 4.2, yang menunjukkan bahwa pada ionisasi +1 penurunan kerapatan elektron masih terlokalisasi di sekitar gugus –COOH dan belum menjangkau ikatan C–C

secara signifikan, sehingga gaya tarik antar atom karbon masih cukup kuat untuk mempertahankan integritas ikatan.

Pemutusan ikatan C–C pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 38,5 fs mengindikasikan bahwa pelepasan dua elektron dari sistem telah menyebabkan defisit kerapatan elektron yang cukup besar pada rantai karbon, sehingga gaya tarik antar atom karbon melemah dan ikatan C–C tidak mampu dipertahankan. Hal ini menunjukkan bahwa nilai energi disosiasi ikatan C–C yang relatif lebih rendah dibandingkan ikatan lain dalam molekul acrylic acid turut berkontribusi terhadap kerentanan ikatan ini terhadap efek ionisasi. Hal ini sejalan pula dengan temuan Galvin et al. (2012) yang menemukan bahwa ikatan C–C yang berikatan langsung dengan gugus karboksil merupakan ikatan paling sensitif terhadap pemutusan pada kondisi ionisasi rendah hingga menengah.

Berbeda dengan ikatan C–C, ikatan O–H pada gugus karboksil 1-AA menunjukkan ketahanan yang jauh lebih tinggi terhadap efek ionisasi pada seluruh kondisi yang disimulasikan. Pola osilasi periodik yang konsisten pada ketiga kondisi ionisasi pada Gambar 4.5 mencerminkan bahwa ikatan O–H tidak mengalami gangguan struktural yang berarti meskipun sistem telah melepaskan hingga dua elektron. Kondisi ini konsisten dengan hasil analisis pola distribusi kerapatan elektron pada subbab 4.2 yang menunjukkan bahwa meskipun gugus –COOH merupakan lokasi utama perubahan kerapatan elektron, ikatan O–H secara spesifik tidak mengalami penurunan yang cukup besar untuk memicu pemutusan ikatan.

Berdasarkan Gambar 4.5 nilai pemutusan ikatan pada monomer acrylic acid menunjukkan kecenderungan meningkat seiring bertambahnya tingkat ionisasi.

Namun, peningkatan tersebut tidak terjadi secara linier. Pada kondisi ion +1, nilai pemutusan ikatan masih relatif mendekati kondisi netral. Hal ini menunjukkan bahwa pelepasan satu elektron belum memberikan pengaruh yang signifikan terhadap kestabilan struktur monomer karena sistem masih mampu melakukan redistribusi kerapatan elektron (electronic relaxation). Akibatnya, ikatan C–C masih mempertahankan sebagian besar kekuatan ikatannya sehingga peluang terjadinya pemutusan belum meningkat secara nyata.

Sebaliknya, mulai pada kondisi ion +2 hingga ion +4 terjadi peningkatan nilai pemutusan ikatan yang jauh lebih tajam. Pelepasan dua atau lebih elektron menyebabkan defisiensi elektron yang semakin besar sehingga kerapatan elektron pada ikatan C–C menurun secara signifikan. Penurunan tersebut mengakibatkan orde ikatan berkurang dan gaya tarik antaratom melemah, sehingga energi yang diperlukan untuk memutus ikatan menjadi lebih kecil. Oleh karena itu, peluang terjadinya pemutusan ikatan pada monomer acrylic acid meningkat secara signifikan pada tingkat ionisasi yang lebih tinggi.

Secara keseluruhan, hasil simulasi AIMD pada 1-AA menegaskan bahwa mekanisme radiolisis monomer acrylic acid akibat paparan radiasi gamma berlangsung secara dominan melalui pemutusan ikatan C–C pada rantai karbon utama, bukan melalui pemutusan ikatan O–H pada gugus karboksil. Pola ini selaras dengan mekanisme degradasi polimer yang dikemukakan oleh Bhattacharya (2012), yang menyatakan bahwa pemutusan ikatan pada rantai karbon utama merupakan jalur degradasi paling dominan pada polimer organik yang terpapar radiasi gamma.

4.2.3.2 Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Dimer Acrylic Acid dalam Keadaan Netral dan Bermuatan

Hasil pemutusan ikatan C–C dan O–H pada dimer acrylic acid (2-AA) dalam berbagai kondisi ionisasi ditunjukkan pada Tabel 4.6. Berdasarkan tabel tersebut, terlihat pola yang konsisten dengan 1-AA namun dengan karakteristik disosiasi yang berbeda akibat bertambahnya jumlah unit monomer dalam sistem. Pada kondisi netral dan ionisasi +1 tidak terjadi pemutusan ikatan, sedangkan pada ionisasi +2 teramati satu titik pemutusan ikatan C–C, dan pada ionisasi +4 teramati dua titik pemutusan ikatan C–C secara simultan. Ikatan O–H pada seluruh kondisi ionisasi konsisten tidak mengalami pemutusan.

Pada kondisi netral dan ionisasi +1, kerapatan elektron ikat pada ikatan C–C masih cukup untuk mempertahankan kestabilan struktural rantai karbon 2-AA. Kondisi ini konsisten dengan hasil analisis *electron density difference* pada subbab 4.2 yang menunjukkan bahwa pada ionisasi +1 penurunan kerapatan elektron pada dimer masih terlokalisasi pada beberapa gugus karboksil dan belum menyebar secara signifikan ke ikatan C–C pada rantai karbon utama.

Pemutusan ikatan C–C pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 58,5 fs menunjukkan bahwa pelepasan dua elektron telah mengganggu keseimbangan distribusi elektron pada rantai karbon secara signifikan, sehingga gaya tarik antar atom karbon melemah dan ikatan C–C mengalami disosiasi. Jika dibandingkan dengan 1-AA yang mengalami disosiasi pada 38,5 fs dengan ionisasi yang sama (+2), waktu disosiasi 2-AA yang lebih lama yaitu 58,5 fs menunjukkan bahwa bertambahnya jumlah unit monomer memberikan kemampuan yang lebih besar bagi sistem untuk mendistribusikan muatan ke seluruh struktur molekul, sehingga pelemahan ikatan C–C berlangsung lebih bertahap.

Pada ionisasi +4, kedua ikatan C–C yaitu C2–C6 dan C4–C7 mengalami pemutusan secara bersamaan dengan waktu disosiasi yang hampir identik yaitu 40 fs dan 39 fs. Pemutusan yang terjadi secara simultan ini dapat dijelaskan oleh distribusi muatan ionisasi yang tersebar merata pada kedua segmen rantai karbon dimer, sehingga tidak ada satu ikatan yang lebih lemah dibandingkan yang lain. Kondisi ini mengindikasikan bahwa pada ionisasi +4, defisit kerapatan elektron yang sangat besar menyebabkan degradasi rantai polimer yang lebih masif dan simultan dibandingkan ionisasi +2. Pola ini selaras dengan hasil Mancuso (2022) yang menunjukkan bahwa semakin tinggi tingkat ionisasi pada molekul yang mengandung gugus karboksil, semakin cepat dan masif disosiasi ikatan C–C terjadi karena tolakan antara inti atom karbon mendominasi interaksi antar atom.

Berdasarkan Gambar 4.6 dimer acrylic acid juga menunjukkan pola yang serupa dengan monomer, yaitu meningkatnya nilai pemutusan ikatan seiring bertambahnya tingkat ionisasi. Pada kondisi ion +1, perubahan nilai pemutusan ikatan masih relatif kecil dibandingkan kondisi netral. Hal ini mengindikasikan bahwa hilangnya satu elektron masih dapat dikompensasi melalui redistribusi elektron di sepanjang struktur dimer, sehingga kestabilan ikatan C–C belum mengalami penurunan yang signifikan.

Peningkatan nilai pemutusan mulai terlihat jelas pada kondisi ion +2 hingga ion +4. Kehilangan elektron dalam jumlah yang lebih besar menyebabkan distribusi kerapatan elektron pada ikatan C–C semakin berkurang sehingga ikatan menjadi lebih lemah. Selain itu, struktur dimer memiliki lebih banyak atom dan ikatan dibandingkan monomer sehingga redistribusi elektron yang terjadi akibat ionisasi memengaruhi lebih banyak pusat ikatan. Kondisi ini menyebabkan kecenderungan

terjadinya *chain scission* meningkat secara signifikan pada tingkat ionisasi yang lebih tinggi, sebagaimana ditunjukkan oleh kenaikan nilai pemutusan ikatan pada grafik.

Ketahanan ikatan O–H terhadap seluruh kondisi ionisasi pada 2-AA, termasuk pada ionisasi setinggi +4, memperlihatkan pola yang konsisten dengan 1-AA. Meskipun pada ionisasi +4 terdapat peningkatan amplitudo fluktuasi ikatan O–H pada awal simulasi, ikatan ini kembali stabil dan tidak mengalami pemutusan hingga akhir simulasi. Hal ini menegaskan bahwa efek resonansi gugus –COOH yang menyebarkan penurunan kerapatan elektron secara merata tetap berfungsi melindungi ikatan O–H bahkan pada kondisi ionisasi yang lebih tinggi. Dengan demikian, mekanisme radiolisis dimer acrylic acid akibat paparan radiasi gamma lebih dominan berlangsung melalui pemutusan ikatan C–C pada rantai utama polimer, sedangkan gugus karboksil tetap terjaga integritasnya pada seluruh kondisi ionisasi yang disimulasikan.

4.2.3.3 Radiolisis Pemutusan Ikatan C–C dan O–H pada Trimer Acrylic Acid dalam Keadaan Netral dan Bermuatan

Hasil pemutusan ikatan C–C dan O–H pada trimer acrylic acid (3-AA) dalam berbagai kondisi ionisasi ditunjukkan pada Tabel 4.7. Berdasarkan tabel tersebut, terlihat pola yang konsisten dengan 1-AA dan 2-AA namun dengan karakteristik disosiasi yang semakin kompleks seiring bertambahnya jumlah unit monomer dalam sistem. Pada kondisi netral dan ionisasi +1 tidak terjadi pemutusan ikatan, pada ionisasi +2 teramati satu titik pemutusan ikatan C–C, dan pada ionisasi +6 teramati tiga titik pemutusan ikatan C–C secara berurutan. Ikatan O–H pada seluruh kondisi ionisasi konsisten tidak mengalami pemutusan.

Pada kondisi netral dan ionisasi +1, kerapatan elektron ikat pada ikatan C–C masih cukup untuk mempertahankan kestabilan struktural rantai karbon 3-AA meskipun memiliki rantai polimer yang lebih panjang. Kondisi ini konsisten dengan hasil analisis pola distribusi kerapatan elektron pada subbab 4.2 yang menunjukkan bahwa pada ionisasi +1 penurunan kerapatan elektron pada trimer masih terlokalisasi pada gugus karboksil dan belum menyebar secara signifikan ke seluruh ikatan C–C pada rantai karbon utama.

Pemutusan ikatan C–C pada ionisasi +2 dengan waktu disosiasi 67 fs menunjukkan pola yang menarik jika dibandingkan dengan 1-AA (38,5 fs) dan 2-AA (58,5 fs) pada ionisasi yang sama. Waktu disosiasi 3-AA yang paling lama di antara ketiga model mengindikasikan bahwa semakin panjang rantai polimer, semakin besar kemampuan sistem untuk mendistribusikan muatan ke seluruh struktur molekul, sehingga pelemahan ikatan C–C berlangsung lebih bertahap dan membutuhkan waktu yang lebih lama untuk mencapai titik disosiasi. Temuan ini selaras dengan hasil Abolfath (2022) yang menyatakan bahwa kestabilan struktur molekul di bawah radiasi sangat dipengaruhi oleh kemampuan sistem dalam mendistribusikan muatan secara merata ke seluruh bagian molekul.

Pada ionisasi +6, ketiga ikatan C–C yaitu C6–C10, C4–C9, dan C2–C8 mengalami pemutusan secara berurutan dengan selisih waktu yang sangat kecil antara satu ikatan dengan ikatan berikutnya. Pemutusan pertama terjadi pada ikatan C6–C10 di waktu 37,5 fs, diikuti oleh C4–C9 pada 40,5 fs, dan C2–C8 pada 43 fs. Pola pemutusan berurutan ini berbeda dengan pola pemutusan simultan yang teramati pada 2-AA dengan ionisasi +4, dan dapat dijelaskan oleh distribusi muatan ionisasi yang meskipun tersebar luas pada seluruh rantai trimer, namun tidak

sepenuhnya merata sehingga masih terdapat perbedaan tingkat pelemahan antar ikatan C–C. Pelepasan enam elektron sekaligus menyebabkan defisit kerapatan elektron yang sangat besar pada seluruh rantai karbon sehingga ketiga ikatan C–C tidak mampu bertahan bahkan sejak tahap awal simulasi, dengan seluruh proses pemutusan ketiga ikatan selesai dalam rentang waktu kurang dari 43 fs. Hal ini selaras dengan temuan Mancuso (2022) yang menunjukkan bahwa semakin tinggi tingkat ionisasi pada molekul yang mengandung gugus karboksil, semakin cepat dan masif disosiasi ikatan C–C terjadi.

Hasil pada Gambar 4.9 menunjukkan bahwa trimer acrylic acid memiliki tren peningkatan nilai pemutusan ikatan yang sama dengan monomer dan dimer. Pada kondisi ion +1, nilai pemutusan ikatan masih relatif mendekati kondisi netral, yang menunjukkan bahwa pelepasan satu elektron belum cukup untuk menyebabkan destabilisasi struktur secara signifikan. Sistem masih mampu mempertahankan kestabilan sebagian besar ikatan melalui redistribusi elektron sehingga perubahan yang terjadi masih relatif kecil.

Sebaliknya, pada kondisi ion +2 hingga ion +4 terjadi peningkatan nilai pemutusan ikatan yang lebih tajam. Pelepasan elektron dalam jumlah yang lebih besar menyebabkan penurunan kerapatan elektron pada ikatan C–C sehingga kekuatan ikatan semakin melemah. Pada struktur trimer, jumlah atom dan panjang rantai yang lebih besar menyebabkan lebih banyak ikatan yang dipengaruhi oleh proses ionisasi. Akibatnya, peluang terjadinya *chain scission* menjadi semakin tinggi pada tingkat ionisasi yang lebih besar, yang tercermin dari peningkatan nilai pemutusan ikatan pada grafik.

Ketahanan ikatan O–H terhadap seluruh kondisi ionisasi pada 3-AA, termasuk pada ionisasi setinggi +6, memperlihatkan pola yang konsisten dengan 1-AA dan 2-AA. Lonjakan amplitudo pada awal simulasi ionisasi +6 yang sempat mencapai sekitar 1,10 Å menunjukkan bahwa pelepasan enam elektron sekaligus memberikan gangguan yang lebih besar pada gugus O–H dibandingkan kondisi ionisasi lainnya. Namun demikian, ikatan O–H tetap tidak mengalami pemutusan karena efek resonansi gugus –COOH masih mampu mendistribusikan penurunan kerapatan elektron secara merata pada seluruh gugus karboksil, sehingga tidak ada satu pun ikatan O–H yang mengalami penurunan kerapatan elektron cukup besar untuk memicu pemutusan. Dengan demikian, mekanisme radiolisis trimer acrylic acid akibat paparan radiasi gamma lebih dominan berlangsung melalui pemutusan ikatan C–C pada rantai utama polimer dengan laju yang semakin cepat seiring meningkatnya tingkat ionisasi, sedangkan gugus karboksil tetap terjaga integritasnya pada seluruh kondisi ionisasi yang disimulasikan.

4.2.4 Implikasi Hasil Radiolisis terhadap Efektivitas Acrylic Acid sebagai Material *Drug Delivery System*

Salah satu syarat utama acrylic acid sebagai material *drug delivery system* (DDS) yaitu kemampuannya dalam mengikat dan memerangkap molekul obat dengan kuat di dalam matriks polimernya. Kemampuan ini diperoleh melalui pembentukan jaringan ikatan silang (*crosslink*) antar rantai polimer acrylic acid yang terbentuk akibat paparan radiasi gamma. Berdasarkan hasil simulasi dalam penelitian ini, pemutusan ikatan C–C pada rantai karbon utama acrylic acid akibat proses ionisasi menghasilkan radikal bebas yang berperan sebagai titik inisiasi pembentukan jaringan *crosslink* tersebut. Dengan demikian, pemahaman mengenai kondisi ionisasi yang memicu pemutusan ikatan C–C menjadi sangat penting dalam

menentukan parameter iradiasi yang optimal untuk menghasilkan material acrylic acid yang efektif sebagai carrier obat dalam sistem DDS.

Hasil simulasi AIMD menunjukkan bahwa pemutusan ikatan C–C pertama kali teramati pada ionisasi +2 untuk ketiga model acrylic acid, yang mengindikasikan bahwa ionisasi +2 merupakan ambang batas minimum yang diperlukan untuk memicu pemutusan ikatan C–C dan menginisiasi pembentukan *crosslink*. Pada kondisi di bawah ionisasi +2, yaitu pada kondisi netral dan ionisasi +1, tidak terjadi pemutusan ikatan C–C sehingga tidak terbentuk radikal bebas yang cukup untuk menginisiasi *crosslink*. Hal ini menunjukkan bahwa dosis radiasi gamma yang menghasilkan ionisasi minimum +2 merupakan syarat dasar agar acrylic acid dapat membentuk jaringan *crosslink* yang mampu memerangkap molekul obat secara efektif (Kanbua et al., 2022).

Parameter waktu disosiasi ikatan C–C yang diperoleh dari simulasi AIMD memiliki relevansi langsung terhadap efisiensi penangkapan obat dalam aplikasi DDS. Semakin cepat waktu disosiasi ikatan C–C, semakin segera radikal bebas terbentuk, dan semakin cepat pula jaringan *crosslink* dapat terbentuk untuk memerangkap molekul obat. Pada ionisasi +2, waktu disosiasi C–C adalah 38,5 fs untuk m-AA, 58,5 fs untuk 2-AA, dan 67 fs untuk 3-AA. Ketika ionisasi ditingkatkan, tidak hanya waktu disosiasi yang semakin cepat, tetapi jumlah titik pemutusan ikatan C–C juga bertambah secara proporsional dengan jumlah unit monomer, yaitu dua titik pemutusan pada 2-AA dengan ionisasi +4 dan tiga titik pemutusan pada 3-AA dengan ionisasi +6. Bertambahnya jumlah titik pemutusan ikatan C–C secara langsung meningkatkan jumlah titik *crosslink* yang terbentuk,

sehingga kapasitas matriks polimer dalam memerangkap molekul obat semakin besar.

Selain itu, hasil penelitian ini menunjukkan bahwa ikatan O–H pada gugus karboksil (–COOH) konsisten tidak mengalami pemutusan pada seluruh kondisi ionisasi yang disimulasikan. Keutuhan gugus –COOH ini sangat penting bagi fungsi DDS karena gugus karboksil merupakan gugus aktif yang bertanggung jawab terhadap sifat bioadhesif dan hidrofilik acrylic acid, yaitu kemampuannya untuk berinteraksi dengan permukaan mukosa dan melepaskan obat secara terkontrol di dalam tubuh. Apabila ikatan O–H ikut mengalami pemutusan, gugus –COOH akan rusak dan acrylic acid kehilangan sifat bioadhesifnya sehingga tidak lagi mampu menjalankan fungsinya sebagai carrier obat yang efektif. Terjaganya ikatan O–H pada seluruh kondisi ionisasi yang disimulasikan menunjukkan bahwa mekanisme radiolisis acrylic acid bersifat selektif, yaitu hanya memutus ikatan C–C untuk membentuk *crosslink* tanpa merusak gugus –COOH yang mempertahankan sifat fungsional acrylic acid sebagai material DDS.

Secara keseluruhan, hasil simulasi AIMD pada ketiga model acrylic acid menunjukkan bahwa ionisasi minimum +2 merupakan syarat dasar terbentuknya *crosslink* pada acrylic acid sebagai material DDS. Model trimer acrylic acid (3-AA) pada ionisasi +6 menunjukkan potensi paling besar karena menghasilkan tiga titik *crosslink* dalam waktu kurang dari 43 fs, yang mengindikasikan kapasitas pemerangkapan obat yang lebih besar dibandingkan model monomer maupun dimer. Temuan ini secara teoritis mendukung penggunaan acrylic acid yang dimodifikasi dengan iradiasi gamma sebagai material carrier obat yang efektif dalam sistem drug delivery system, dengan ionisasi minimum +2 dan panjang rantai

polimer sebagai parameter kunci yang menentukan efektivitas pembentukan *crosslink* dan kapasitas pemerangkapan obat (Jeong et al., 2019).

4.2.5 Analisis Perbandingan Hasil dengan Penelitian Sebelumnya

Untuk memperkuat validitas hasil penelitian ini, mekanisme radiolisis yang diperoleh dari simulasi komputasi dibandingkan dengan temuan penelitian Hill et al. (1992) yang mengkaji radiolisis gamma pada acrylic acid secara eksperimental menggunakan spektroskopi *electron spin resonance* (ESR). Perbandingan ini dilakukan berdasarkan skematik mekanisme radiolisis yang terjadi pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$) akibat radiasi gamma sebagai pusat reaktivitas utama dalam struktur acrylic acid.

(D.J.T. Hill, 1992) menyatakan bahwa gugus $-\text{COOH}$ dalam acrylic acid bersifat sangat sensitif terhadap paparan radiasi gamma, dan degradasinya dapat dideteksi melalui terbentuknya gas CO dan CO_2 sebagai produk radiolisis. Nilai G ($-\text{COOH}$) yang diperoleh untuk acrylic acid sebesar 8,4 pada suhu 77 K dan 12,1 pada suhu 300 K, jauh lebih tinggi dibandingkan asam karboksilat bermolekul rendah yang hanya berkisar 4–6. Rasio $\text{CO}:\text{CO}_2$ pada acrylic acid juga jauh lebih tinggi (0,35) dibandingkan molekul kecil (0,1), yang mengindikasikan bahwa mekanisme degradasi pada polimer berlangsung melalui jalur yang berbeda.

Hill et al. (1992) mengusulkan bahwa degradasi gugus karboksil berlangsung melalui dua jalur, yaitu melalui radikal kationik dan anionik, dengan jalur radikal anion yang diyakini lebih dominan pada sistem polimer, serta peran keadaan tereksitasi (*excited states*) yang signifikan dalam proses tersebut.

Hasil penelitian ini secara komputasi menunjukkan konsistensi sekaligus memberikan perspektif baru terhadap temuan Hill et al. (1992). Berdasarkan

analisis *electron density difference*, perubahan distribusi kerapatan elektron paling dominan teramati pada gugus -COOH di seluruh model acrylic acid (1-AA, 2AA, dan 3AA), yang konsisten dengan pernyataan Hill et al. (1992) bahwa gugus -COOH merupakan lokasi paling sensitif terhadap radiasi gamma.

Meski demikian, hasil simulasi AIMD menunjukkan bahwa pemutusan ikatan yang dominan terjadi pada ikatan C–C rantai karbon utama, sedangkan ikatan O–H pada gugus karboksil tetap stabil pada seluruh kondisi ionisasi yang disimulasikan. Perbedaan ketahanan kedua ikatan ini berkaitan erat dengan karakteristik ikatan masing-masing atom. Ikatan C–C pada rantai karbon utama merupakan ikatan tunggal sigma (σ) yang tidak memiliki mekanisme stabilisasi tambahan, sehingga penurunan kerapatan elektron akibat ionisasi langsung berdampak pada pelemahan gaya tarik antar atom karbon. Berbeda halnya dengan ikatan O–H pada gugus karboksil yang distabilkan oleh efek resonansi antara ikatan C=O dan C–O dalam gugus -COOH . Resonansi ini menyebabkan kerapatan elektron terdistribusi secara merata pada gugus karboksil, sehingga ikatan O–H mampu mempertahankan stabilitasnya meskipun sistem mengalami ionisasi.

Perbedaan temuan antara penelitian ini dan Hill et al. (1992) juga dapat dipahami dari perbedaan skala pengamatan yang digunakan. Hill et al. (1992) mengkaji produk akhir radiolisis acrylic acid secara eksperimental berupa gas CO dan CO_2 , yang merupakan hasil dari serangkaian reaksi lanjutan setelah pemutusan ikatan awal. Sementara itu, simulasi AIMD dalam penelitian ini menangkap tahap paling awal dari mekanisme radiolisis pada skala femtosecond, yaitu pemutusan ikatan C–C sebagai peristiwa pertama yang terjadi akibat ionisasi. Dengan demikian, kedua pendekatan ini saling melengkapi: pemutusan C–C yang teramati

secara komputasi merupakan tahap inisiasi yang mendahului serangkaian reaksi lanjutan yang pada akhirnya menghasilkan produk CO dan CO₂ sebagaimana diamati oleh Hill et al. (1992) secara eksperimental.

Secara keseluruhan, perbandingan ini menegaskan bahwa gugus –COOH merupakan pusat reaktivitas utama dalam radiolisis acrylic acid akibat paparan radiasi gamma, namun mekanisme pemutusan ikatannya berlangsung secara bertahap dimulai dari destabilisasi ikatan C–C pada rantai karbon utama sebelum degradasi gugus karboksil lebih lanjut terjadi.

4.3 Kajian Keislaman

Pengembangan sistem penghantaran obat (*drug delivery system*) menggunakan polimer acrylic acid yang dimodifikasi melalui radiasi gamma merupakan salah satu wujud ikhtiar ilmiah manusia dalam menemukan metode pengobatan yang lebih efektif, selektif, dan aman (Gusti et al., 2023) Dalam pandangan Islam, upaya mencari dan mengembangkan pengobatan merupakan kewajiban yang dianjurkan, sebab kesehatan adalah amanah dari Allah SWT yang harus dijaga dan dipulihkan dengan sebaik-baiknya. Hal ini sebagaimana ditegaskan dalam Q.S. asy-Syu'ara (26): 80,

وَ إِذَا مَرَضْتُ فَهُوَ يَشفِينِ ﴿٨٠﴾

Artinya: “Dan apabila aku sakit, Dialah yang menyembuhkanku.”

Q.S. asy-Syu'ara (26): 80 merupakan pengakuan Nabi Ibrahim AS bahwa kesembuhan sejati hanya berasal dari Allah SWT, sekaligus mengakui kenyataan sakit sebagai bagian dari realitas biologis kehidupan manusia (Sukmal, 2019). Quraish Shihab dalam Tafsir Al-Misbah menjelaskan bahwa penyandaran kesembuhan kepada Allah dalam ayat ini bukan berarti meniadakan usaha dan

sebab-sebab lahiriah, melainkan menempatkan Allah sebagai *Musabbibul Asbāb* (penyebab dari segala sebab), sehingga pengobatan, teknologi medis, dan riset ilmiah dipahami sebagai *wasilah* (perantara) yang telah Allah ciptakan bagi manusia (Shihab, 2002). Oleh karena itu, pengembangan polimer acrylic acid berbasis iradiasi gamma sebagai material *drug delivery system* merupakan bagian dari ikhtiar yang dianjurkan dalam islam.

Dalam perspektif yang lebih luas, konsep syifa' juga dijelaskan Q.S. an-Nahl (16): 69. Dalam Tafsir Al-Azhar, Hamka menjelaskan bahwa ayat ini bukan sekadar membicarakan khasiat madu secara harfiah, melainkan mengandung isyarat yang lebih dalam bahwa Allah telah menyediakan potensi penyembuhan pada berbagai ciptaan-Nya di alam semesta. Menurutnya, manusia yang berpikir (*yatafakkaruun*) akan mampu menggali dan memanfaatkan potensi tersebut melalui pengamatan, penelitian, dan pengembangan ilmu pengetahuan (Hamka, 1989). Pandangan ini sejalan dengan semangat penelitian ini, acrylic acid sebagai polimer organik digali potensinya melalui kajian mekanisme radiolisis untuk dikembangkan menjadi material pembawa obat yang bekerja secara terkontrol dan tepat sasaran.

(Padhilah et al, 2024) juga menegaskan bahwa Allah tidaklah zalim terhadap hamba-Nya, sebab setiap penyakit yang diturunkan Allah selalu disertai penawarnya, sebagaimana sabda Rasulullah SAW: “*Tidaklah Allah menurunkan penyakit kecuali Dia juga menurunkan penawarnya.*” Prinsip ini menjadi landasan teologis bagi ilmuwan Muslim untuk terus berijtihad dalam menemukan metode pengobatan baru, termasuk melalui pengembangan *drug delivery system* berbasis polimer acrylic acid yang dimodifikasi dengan iradiasi gamma.

Selain ranah pengobatan, penelitian ini juga mencerminkan penggunaan akal (*'aql*) dalam memahami mekanisme-mekanisme yang bekerja pada tingkat molekuler dan atomik. Allah SWT menciptakan alam dengan sunnatullah yang bersifat teratur, dapat dipelajari, dan dapat dimanfaatkan untuk kemaslahatan manusia. Dorongan untuk menggunakan akal dan mengkaji fenomena alam tersebut tercermin dalam firman Allah 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 سُبْحَانَكَ فَقِنَا عَذَابَ النَّارِ ﴿١٩١﴾

Artinya: "Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi, dan silih bergantinya 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."

Dalam tafsir Al-Misbah, ditegaskan bahwa frasa *ulul albab* (orang-orang yang berakal) merujuk pada mereka yang memadukan dzikir dengan *tafakkur*. Menurut, *tafakkur*, terhadap alam bukan sekedar perenungan pasif, melainkan upaya aktif untuk memahami hukum-hukum yang bekerja di balik ciptaan Allah (Shihab, 2002). Dalam penelitian ini, upaya memahami mekanisme radiolisis *acrylic acid*, yakni bagaimana iradiasi gamma memutus atau menyambung rantai polimer, membentuk radikal bebas hingga mengubah sifat fisikokimia material, merupakan bentuk *tafakkur* ilmiah yang selaras dengan nilai yang dikandung ayat ini. (Misbahuddin, 2015) juga menambahkan bahwa epistemologi al-Qur'an secara inheren mendorong pengembangan sains Islam, dimana pengkajian fenomena alam pada tingkat paling kecil sekalipun merupakan bentuk ibadah intelektual yang sejalan dengan perintah al-Qur'an.

Selain itu, Q.S. Yunus (10): 61 juga memberikan landasan teologis yang relevan. Dalam Tafsir Al-Munir karya Wahbah az-Zuhaili, kata (mitsqala dzarrah) menunjukkan bahwa tidak ada satu pun entitas di alam semesta, sekecil apapun, yang luput dari pengetahuan dan ketetapan Allah. Az-Zuhaili menekankan bahwa Q.S. Yunus (10): 61 secara implisit mengakui keberadaan dan pengaruh nyata dari unsur-unsur yang sangat kecil, meskipun tidak dapat ditangkap oleh indera manusia biasa (Az-Zuhaili, 2013). Dalam konteks penelitian radiolisis acrylic acid, hal ini sangat relevan: mekanisme yang dikaji bekerja pada skala monomer dan subatomik. Fenomena-fenomena pada skala terkecil inilah yang menentukan karakteristik makroskopik material sebagai sistem penghantaran obat. Dengan demikian, Q.S. Yunus (10): 61 dapat dipahami sebagai dorongan teologis bagi ilmuwan Muslim untuk meneliti dan memahami fenomena pada skala paling kecil sekalipun, karena semua itu merupakan bagian dari ketetapan Allah yang dapat digali demi kemaslahatan.

BAB V

PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil analisis dan pembahasan pada penelitian mengenai mekanisme radiolisis acrylic acid akibat radiasi gamma sebagai aplikasi *drug delivery system*, maka diperoleh beberapa kesimpulan sebagai berikut:

1. Model geometri monomer, dimer, dan trimer acrylic acid yang memiliki energi paling rendah diperoleh melalui optimasi geometri berbasis DFT dengan fungsional CAM-B3LYP/6-311++G**. Ketiga model mempertahankan karakteristik utama berupa gugus karboksil ($-\text{COOH}$) yang terikat pada rantai karbon utama dengan panjang ikatan C–C sebesar 1,51 Å dan O–H sebesar 0,96 Å, konsisten dan sesuai dengan data referensi pada seluruh model tanpa dipengaruhi oleh penambahan jumlah unit monomer.
2. Ionisasi akibat paparan radiasi gamma menyebabkan distribusi kerapatan elektron lebih besar terjadi pada gugus karboksil ($-\text{COOH}$) yang berpusat pada ikatan C–C pada rantai karbon utama seiring meningkatnya tingkat ionisasi, sementara ikatan O–H tidak menunjukkan penurunan kerapatan elektron yang signifikan pada seluruh kondisi ionisasi yang dianalisis.
3. Hasil simulasi menunjukkan bahwa radiolisis gugus karboksil pada acrylic acid hanya teramati pada ikatan C–C, tanpa disertai pemutusan ikatan O–H, dengan setiap pemutusan ikatan C–C memerlukan tingkat ionisasi minimum sebesar +2. Berdasarkan hasil tersebut, mekanisme radiolisis gugus karboksil acrylic acid akibat paparan radiasi gamma berlangsung melalui jalur ionisasi langsung, di mana foton gamma memicu pelepasan elektron dari sistem

sehingga menyebabkan distribusi kerapatan elektron pada gugus -COOH yang berpusat pada ikatan C-C , sehingga terjadi radiolisis pada rantai karbon utama hingga terjadi pemutusan ikatan C-C sebagai tahap inisiasi radiolisis, sedangkan ikatan O-H pada gugus karboksil konsisten tidak mengalami pemutusan pada seluruh kondisi ionisasi yang disimulasikan.

5.2 Saran

Penelitian ini masih memiliki beberapa keterbatasan yang dapat dikembangkan pada penelitian selanjutnya. Variasi jumlah monomer dalam penelitian ini dibatasi hingga tiga unit, sehingga disarankan penelitian selanjutnya mengkaji model dengan jumlah monomer yang lebih besar seperti tetramer atau pentamer untuk memperoleh gambaran yang lebih komprehensif mengenai hubungan antara panjang rantai polimer dengan efektivitas pembentukan *crosslink* sebagai material *drug delivery system*. Selain itu, variasi tingkat ionisasi dalam penelitian ini masih terbatas, sehingga eksplorasi tingkat ionisasi yang lebih tinggi pada penelitian selanjutnya dapat memberikan gambaran yang lebih lengkap mengenai batas kestabilan struktural acrylic acid. Penelitian ini juga hanya mengkaji mekanisme inisiasi radiolisis pada skala femtosecond, sehingga disarankan penelitian selanjutnya menggunakan skala waktu yang lebih panjang untuk mengamati reaksi lanjutan pasca pemutusan ikatan C-C , termasuk pembentukan produk radiolisis seperti CO dan CO_2 sebagaimana diamati oleh Campbell et al. (1989) dan Hill et al. (1992).

DAFTAR PUSTAKA

- Ahmed, M. S. (2024). A Comprehensive Review of Radiation-Induced Hydrogels. *A Review of PMC*.
- Angelo, J. (2001). Mucoadhesive drug carriers based on complexes of poly(acrylic acid) (PAA). *Journal of Controlled Release*, 217-227.
- Abuhanoglu, G., & Özer, A. Y. (2014). Radiation sterilization, 6(2), 51–60. <https://doi.org/10.1556/IMAS.6.2014.2.1>
- Allen, T. M., Allen, T. M., & Cullis, P. R. (2017). Drug Delivery Systems : Entering the Mainstream, 1818(2004). <https://doi.org/10.1126/science.1095833>
- Az-Zuhaili, W. (2013). *No Title* (Jilid 1&2). Jakarta: Gema Insani.
- Bazyka, D., Gudzenko, N., Dyagil, I., Iliencko, I., Belyi, D., Chumak, V., ... Bakhanova, E. (2019). Cancers after Chornobyl : From Epidemiology to Molecular Quantification, (CII).
- Eero J. J. Korpela, Jhonatas Carvalho², Hans Lischka, M. K. (2003). /10.1021/. *J. Phys. Chem. A*, 127(4440–4454. DOI:), 1–28.
- Galvin, P., Thompson, D., Ryan, K. B., Mccarthy, A., Moore, A. C., Burke, C. S., ... Gun, Y. K. (2012). Nanoparticle-based drug delivery : case studies for cancer and cardiovascular applications, 389–404. <https://doi.org/10.1007/s00018-011-0856-6>
- Gerin, J. P. J. (2025). Fundamentals of Water Radiolysis. *Encyclopedia*, 5(38), 1–19.
- Hemostasis, D., 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.
- Iftimie, R., Minary, P., & Tuckerman, M. E. (2005). developments , and future trends, 102(19), 6654–6659. <https://doi.org/10.1073/pnas.0500193102>
- Ikfi Rizqia, Muslimah Susilayati, A. B. (2020). THE SCIENTIFIC CUES STUDY OF “ZARRAH” IN AL-QUR’AN AS KNOWLEDGE CONTENT ON MODERN PHYSICS LEARNING BASED ON TPACK Kajian. *Journal of Islamic Social Sciences and Humanities*, 23(1), 1–14.
- Jabbari, E., & Nozari, S. (2015). Synthesis of Acrylic Acid Hydrogel by γ -Irradiation Cross-linking of Polyacrylic Acid in Aqueous Solution Synthesis of Acrylic Acid Hydrogel by γ -Irradiation Cross-linking of Polyacrylic Acid in Aqueous Solution, (October 1999).
- Jafari, M., Najafi, G. R., Sharif, M. A., & Elyasi, Z. (2021). Superabsorbent polymer composites derived from polyacrylic acid: Design and synthesis, characterization, and swelling capacities. *Polymers and Polymer Composites*, 29(6), 733–739. <https://doi.org/10.1177/0967391120933482>
- Jeong, J., Park, J., Kim, E. J., Jeong, S., Lee, J. Y., & Lim, Y. (2019). Preparation

of Radiation Cross-Linked Poly (Acrylic Acid) Hydrogel Containing Metronidazole with Enhanced Antibacterial Activity.

- Joel, A., Terry, R., Chudoung, J., Simon, R., Forrest, B., Jeffrey, S., ... Stephen, C. (2024). Approved for public release ; distribution is unlimited . Title : Issued :, 28.
- Kanbua, C., Sirichaibhinyo, T., Rattanawongwiboon, T., Lertsarawut, P., Chanklinhorm, P., & Ummartyotin, S. (2022). South African Journal of Chemical Engineering Gamma radiation -induced crosslinking of Ca²⁺ loaded poly (acrylic acid) and poly (ethylene glycol) diacrylate networks for polymer gel electrolytes. *South African Journal of Chemical Engineering*, 39(June 2021), 90–96. <https://doi.org/10.1016/j.sajce.2021.11.007>
- Kohn, W., Becke, A. D., & Parr, R. G. (1996). Density Functional Theory of Electronic Structure. *Journal Physical Chemistry*, 100(31), 12974–12980.
- Krack, M., Mohamed, F. R., Parrinello, M., & Ku, T. D. (2007). Efficient and Accurate Car-Parrinello-like Approach to Born-Oppenheimer Molecular Dynamics, *066401*(February), 1–4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.066401>
- Langer, R. (1998). Langer392_Nat_Sup_98.pdf.
- Li, S., Ā, H. Z., Ā, K. C., Jin, M., Hai, S., Jung, S., & He, N. (2022). Application of chitosan / alginate nanoparticle in oral drug delivery systems : prospects and challenges. *Drug Delivery*, 29(1), 1142–1149. <https://doi.org/10.1080/10717544.2022.2058646>
- Linome, D. W., Hali, A. S., Bani, M. D. S., & Hauwali, N. U. J. (2024). Studi Sifat Elektronik Grafit Menggunakan Metode Density Functional Theory. *Wahana Fisika*, 9(2), 125–132.
- Misbahuddin. (2015). EPISTEMOLOGI AL-QURAN DALAM MEMBANGUN SAINS ISLAM Iing Misbahuddin, 26, 3–15.
- Naikwadi, A. T., Sharma, B. K., & Bhatt, K. D. (2022). Gamma Radiation Processed Polymeric Materials for High Performance Applications : A Review, 10(March), 1–15. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.837111>
- Nakan, U., Tolkyn, B., Adikanova, D. B., Negim, E. S., Yeligbayeva, G. Z., Seilkhanov, T. M., ... Abdiyev, K. Z. (2022). Characterization and Swelling Properties of Copolymer Poly(N, N-dimethyl acrylamide-co-acrylic acid) and Homopolymer Poly(acrylic acid). *Egyptian Journal of Chemistry*, 65(4), 767–773. <https://doi.org/10.21608/ejchem.2021.95005.4465>
- Nanogels, R. P., Rurarz, B. P., Urbanek, K. A., Karczmarczyk, U., Raczowska, J., Kozieł, M. J., & Kowalska, K. (2023). Towards Cancer Nanoradiopharmaceuticals — Radioisotope Nanocarrier System for Prostate Cancer Theranostics Based on.

- Nayan, M. U., Panja, S., Sultana, A., Zaman, L. A., & Vora, L. K. (2024). Polymer delivery systems for long-acting antiretroviral drugs *Polymer Delivery Systems for Long-Acting Antiretroviral Drugs*, 16.
- Nur Padhilah, Mardian idris Harahap, T. W. U. (2024). MAKNA SYIFA ' DALAM PERSPEKTIF AL- QUR ' AN SURAH YUNUS AYAT 57 Nur Padilah UIN Sumatera Utara , Medan , Indonesia Mardian Idris Harahap UIN Sumatera Utara , Medan , Indonesia Trinisna Wati Utami UIN Sumatera Utara , Medan , Indonesia *Abstrak*, 18(3), 2312–2321.
- Paquet, E. (2018). Computational Methods for Ab Initio Molecular Dynamics, 2018. <https://doi.org/10.1155/2018/9839641>
- Parrinelo, R. car and M. (1985). Physical review letters 25. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 55(22).
- Patra, J. K., Das, G., Fraceto, L. F., Vangelie, E., Campos, R., Rodriguez, P., ... Grillo, R. (2018). Nano based drug delivery systems : recent developments and future prospects. *Journal of Nanobiotechnology*, 1–33. <https://doi.org/10.1186/s12951-018-0392-8>
- Rahman, I. A., & Purqon, A. (2015). Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS 2. *PROSIDING SKF 2015*, 497–503.
- Rizwan, M., Yahya, R., Hassan, A., Yar, M., Azzahari, A. D., Selvanathan, V., & Sonsudin, F. (2017). pH Sensitive Hydrogels in Drug Delivery : Brief History , Properties , Swelling , and Release Mechanism , Material Selection and Applications. <https://doi.org/10.3390/polym9040137>
- Romadhoni, D. (2022). SINTESIS POLIMER SUPERABSORBEN PATI TROPIS POLIAKRILAT SERTA APLIKASINYA PADA TANAMAN SELADA AIR (Nastruim Officinale R.Br). *Jurnal Crystal : Publikasi Penelitian Kimia Dan Terapannya*, 4(1), 7–15. <https://doi.org/10.36526/jc.v4i1.2060>
- Saravanakumar, K., Swapna, P., Nagaveni, P., Vani, P., & Pujitha, K. (2015). Transdermal drug delivery system: A review. *Journal of Global Trends in Pharmaceutical Sciences*, 6(1), 2485–2490. <https://doi.org/10.22270/ijmspr.v4i1.21>
- Sauer, J. (1989). Molecular Models in ab Initio Studies of Solids and Surfaces : From Ionic Crystals and Semiconductors to Catalystst, 199–255.
- Shihab, M. Q. (2002). TAFSIR.
- Sukmal, M. (2019). Syifa ` dalam Perspektif Alquran, 1(2), 75–87.
- Sulaeman, A. S., Putro, P. A., & Nikmatin, S. (2022). Thermal studies of hydrogels based on poly (acrylic acid) and its copolymers by differential scanning calorimetry : A systematic literature review, 30, 1–10. <https://doi.org/10.1177/09673911221094022>
- Sun, R., Chen, Y., Pei, Y., Wang, W., Zhu, Z., & Zheng, Z. (2024). Heliyon The drug release of PLGA-based nanoparticles and their application in treatment

- of gastrointestinal cancers. *Heliyon*, 10(18), e38165. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e38165>
- Tania, E., & Yuniarsih, N. (2023). Jurnal Pendidikan dan Konseling, 5, 41–49.
- Teale, A. M., Savin, B. A., Adamo, C. C., Aradi, B., Arbuznikov, A. V, Baerends, G. E. J., ... Levy, B. M. (2022). material. <https://doi.org/10.1039/d2cp02827a>
- Togatorop, S. D. W., & Ahmad, A. (2024). Studi Struktur Elektronik GaAs Sebagai Material Kandidat Sensor Gas Berbasis Semikonduktor Menggunakan Density Functional Theory. *Conference Paper ICHSE*, (October 2023), 0–8.
- Ways, T. M. M., & Lau, W. M. (2018). Chitosan and Its Derivatives for Application in Mucoadhesive Drug Delivery Systems. <https://doi.org/10.3390/polym10030267>
- 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.
- Yakin, K. (2024). *First-Principles Study on Proton Transfer in Triazole Molecules [Tesis Disertasi]*. Kanazawa University.
- 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. Optimasi model geometri monomer acrylic acid, dimer acrylic acid, dan trimer acrylic acid

Monomer Acrylic Acid

```

1. =====
2. Title                      Coordinates from ORCA-job OG-PAA E -
   307.678148945990
3.
4. Lattice type                P
5. Space group name           P 1
6. Space group number         1
7. Setting number             1
8.
9. Lattice parameters
10.
11.   a           b           c       alpha       beta       gamma
12. 1.00000    1.00000    1.00000   90.0000    90.0000    90.0000
13.
14. Unit-cell volume = 1.000000 Å3
15.
16. Structure parameters
17.
18.
19.   U           Site          Sym.         x           y           z           Occ.
20.   0.000      1           -           -1.37431      2.12910      -0.10053      1.000    -
21.   0.000      1           -           -1.59147      0.71506      0.38206      1.000    -
22.   0.000      1           -           -2.98841      0.22648      0.02510      1.000    -
23.   0.000      1           -           -0.49790     -0.19026     -0.20053      1.000    -
24.   0.000      1           -           -2.03938      2.71203     -0.91332      1.000    -
25.   0.000      1           -           -0.29472      2.69730      0.47889      1.000    -
26.   0.000      1           -           0.49760       0.15579      0.07817      1.000    -
27.   0.000      1           -           -0.56286     -0.21908     -1.29091      1.000    -
28.   0.000      1           -           -0.62392     -1.20885      0.17025      1.000    -
29.   0.000      1           -           -3.75860      0.86825      0.45471      1.000    -
30.   0.000      1           -           -3.13046      0.21938     -1.05654      1.000    -
31.   0.000      1           -           -3.13639     -0.78779      0.40062      1.000    -
32.   0.000      1           -           -1.46947      0.73678      1.46905      1.000    -
33.   0.000      1           -           -0.20057      3.58355      0.10300      1.000    -
34. =====
35. Number of polygons and unique vertices on isosurface = 0 (0)
36. 14 atoms, 13 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 16 ms

```

Dimer Acrylic Acid

```

1. =====
2. Title                      Coordinates from ORCA-job OG-2PAA E -
   574.860868671833
3. Lattice type                P
4. Space group name           P 1

```

```

5. Space group number 1
6. Setting number 1
7.
8. Lattice parameters
9.
10. a b c alpha beta gamma
11. 1.00000 1.00000 1.00000 90.0000 90.0000 90.0000
12.
13. Unit-cell volume = 1.000000 Å^3
14.
15. Structure parameters
16.
17.
17.      x y z Occ.
      U Site Sym.
18. 1 C C1 -3.46749 0.71485 0.82346 1.000 -
   0.000 1 -
19. 2 C C2 -2.19620 0.88248 -0.01993 1.000 -
   0.000 1 -
20. 3 C C3 -0.95538 0.43544 0.74737 1.000 -
   0.000 1 -
21. 4 C C4 0.33154 0.41122 -0.07184 1.000 -
   0.000 1 -
22. 5 C C5 1.55062 0.10497 0.80885 1.000 -
   0.000 1 -
23. 6 C C6 -2.08432 2.32548 -0.44927 1.000 -
   0.000 1 -
24. 7 H H1 -4.35299 1.03463 0.27391 1.000 -
   0.000 1 -
25. 8 H H2 -3.40134 1.29800 1.74520 1.000 -
   0.000 1 -
26. 9 H H3 -3.59221 -0.33467 1.09330 1.000 -
   0.000 1 -
27. 10 O O1 -2.96023 2.62999 -1.42804 1.000 -
   0.000 1 -
28. 11 O O2 -1.33791 3.14763 0.01307 1.000 -
   0.000 1 -
29. 12 C C7 0.26044 -0.61761 -1.17438 1.000 -
   0.000 1 -
30. 13 H H4 1.64926 0.87178 1.57842 1.000 -
   0.000 1 -
31. 14 H H5 2.46948 0.08845 0.22242 1.000 -
   0.000 1 -
32. 15 H H6 1.43707 -0.86222 1.30443 1.000 -
   0.000 1 -
33. 16 H H7 0.49322 1.38383 -0.54220 1.000 -
   0.000 1 -
34. 17 O O3 -0.49380 -1.55327 -1.22462 1.000 -
   0.000 1 -
35. 18 O O4 1.18516 -0.39661 -2.13037 1.000 -
   0.000 1 -
36. 19 H H8 -2.85787 3.57202 -1.62343 1.000 -
   0.000 1 -
37. 20 H H9 -2.31279 0.28039 -0.92398 1.000 -
   0.000 1 -
38. 21 H H10 1.10696 -1.11120 -2.77793 1.000 -
   0.000 1 -
39. 22 H H11 -0.80680 1.10489 1.59767 1.000 -
   0.000 1 -
40. 23 H H12 -1.14068 -0.56573 1.14321 1.000 -
   0.000 1 -
41. =====
42. Number of polygons and unique vertices on isosurface = 0 (0)
43. 23 atoms, 22 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 0 ms

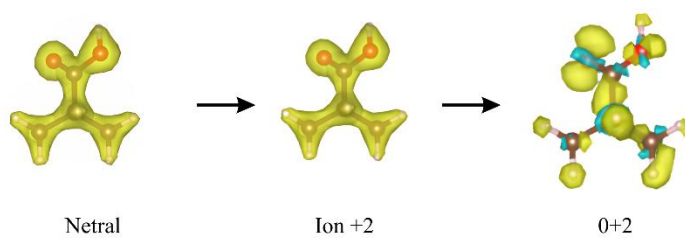
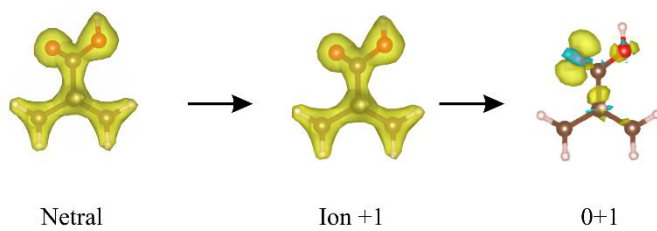
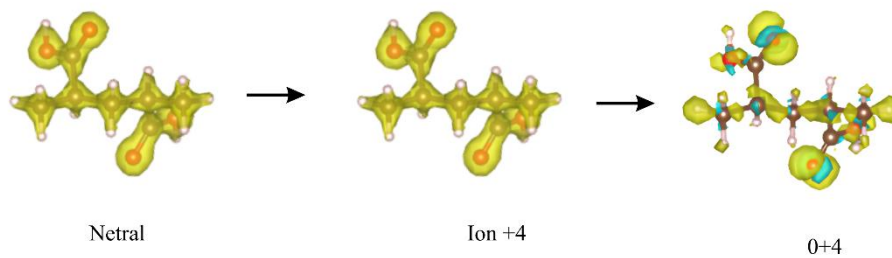
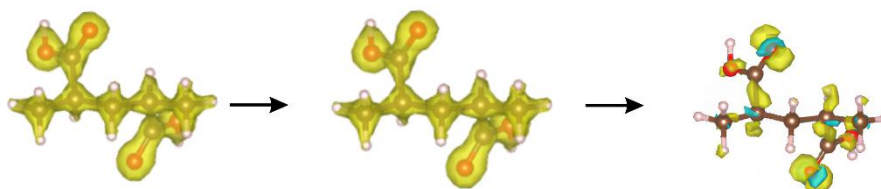
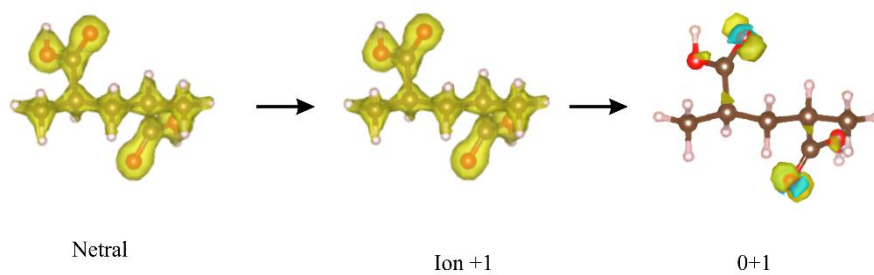
```


Trimer Acrylic Acid

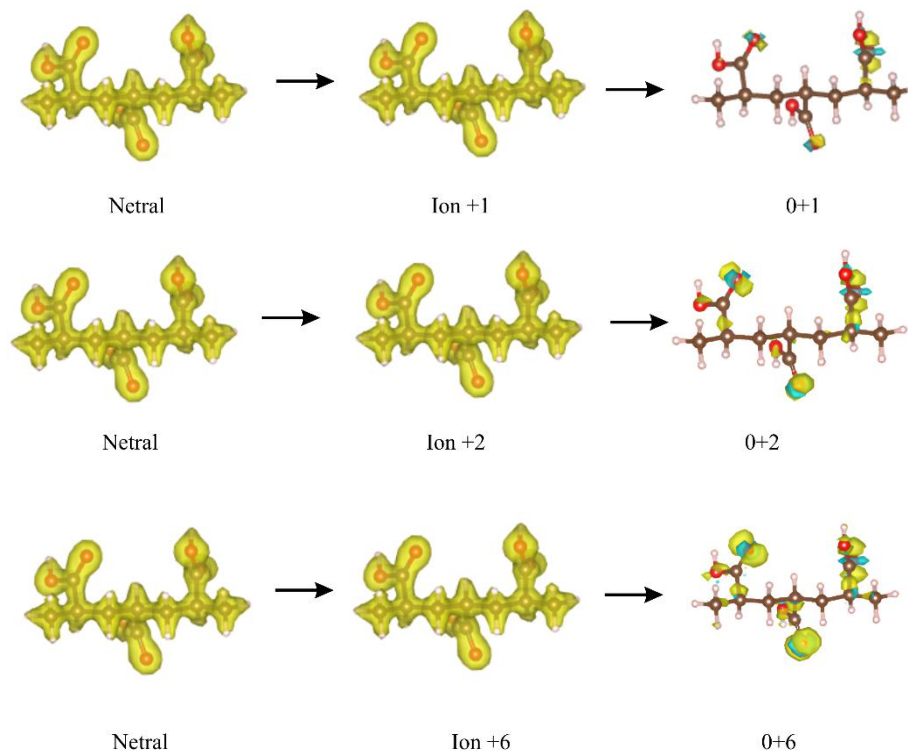
```

1. =====
2. Title                      XYZ file
3.
4. Lattice type                P
5. Space group name           P 1
6. Space group number         1
7. Setting number             1
8. Lattice parameters
9.   a      b      c      alpha    beta    gamma
10. 1.00000 1.00000 1.00000 90.0000  90.0000  90.0000
11. Unit-cell volume = 1.000000 Å^3
12. Structure parameters
13.
      U      Site      Sym.      x      y      z      Occ.
14.  1 C      C1      -      -3.46481  0.68990  0.80192  1.000  -
    0.000  1
15.  2 C      C2      -      -2.20138  0.89356 -0.03133  1.000  -
    0.000  1
16.  3 C      C3      -      -0.95703  0.43007  0.75192  1.000  -
    0.000  1
17.  4 C      C4      -      0.33482  0.40599 -0.08907  1.000  -
    0.000  1
18.  5 C      C5      -      1.54787  0.14353  0.80068  1.000  -
    0.000  1
19.  6 C      C6      -      -2.10562  2.35650 -0.40595  1.000  -
    0.000  1
20.  7 H      H1      -      -4.35520  1.01025  0.24992  1.000  -
    0.000  1
21.  8 H      H2      -      -3.42707  1.27143  1.72991  1.000  -
    0.000  1
22.  9 H      H3      -      -3.59389 -0.36528  1.06415  1.000  -
    0.000  1
23. 10 O      O1      -      -2.86182  2.66298 -1.47768  1.000  -
    0.000  1
24. 11 O      O2      -      -1.45021  3.21764  0.15560  1.000  -
    0.000  1
25. 12 C      C7      -      0.28115 -0.66745 -1.15422  1.000  -
    0.000  1
26. 13 H      H4      -      1.64693  0.92091  1.56533  1.000  -
    0.000  1
27. 14 H      H5      -      2.47162  0.13179  0.21189  1.000  -
    0.000  1
28. 15 H      H6      -      1.46823 -0.82568  1.30572  1.000  -
    0.000  1
29. 16 H      H7      -      0.46003  1.37462 -0.58669  1.000  -
    0.000  1
30. 17 O      O3      -      -0.39110 -1.68447 -1.13958  1.000  -
    0.000  1
31. 18 O      O4      -      1.09901 -0.40340 -2.19143  1.000  -
    0.000  1
32. 19 H      H8      -      -2.72204  3.62506 -1.60328  1.000  -
    0.000  1
33. 20 H      H9      -      -2.28502  0.30946 -0.95510  1.000  -
    0.000  1
34. 21 H      H10     -      0.98046 -1.16904 -2.79197  1.000  -
    0.000  1
35. 22 H      H11     -      -0.80842  1.08987  1.61718  1.000  -
    0.000  1
36. 23 H      H12     -      -1.14278 -0.57349  1.15742  1.000  -
    0.000  1
37. =====
38. Number of polygons and unique vertices on isosurface = 0 (0)
39. 23 atoms, 22 bonds, 0 polyhedra; CPU time = 0 ms

```

Lampiran 2. Distribusi Pola *Elektron Density**Monomer Acrylic Acid**Dimer Acrylic Acid*

Trimer Acrylic Acid



Lampiran 3. Pemutusan Panjang Ikatan C-C dan O-H pada Jumlah Monomer Acrylic Acid

Monomer Acrylic Acid (C-C Ion +2)

s	r	s	r	s	r
0	1.50982	7.5	1.670447	15	2.039759
0.5	1.506454	8	1.693315	15.5	2.06531
1	1.505215	8.5	1.716804	16	2.091008
1.5	1.506119	9	1.740761	16.5	2.116854
2	1.509182	9.5	1.765056	17	2.142842
2.5	1.514411	10	1.789588	17.5	2.168957
3	1.521795	10.5	1.814275	18	2.195177
3.5	1.531299	11	1.839064	18.5	2.221474
4	1.542858	11.5	1.86392	19	2.247817
4.5	1.556375	12	1.888827	19.5	2.274172
5	1.571729	12.5	1.913783	20	2.300505
5.5	1.588774	13	1.938795	20.5	2.32678
6	1.607344	13.5	1.963882	21	2.352962
6.5	1.627266	14	1.98906	21.5	2.379014
7	1.648369	14.5	2.014347	22	2.404898

Dimer Acrylic Acid (C-C Ion +2)

s	r	s	r	s	r
0	1.509691	7.5	1.610823	15	1.790325
0.5	1.510074	8	1.623001	15.5	1.79998
1	1.511402	8.5	1.635435	16	1.809163
1.5	1.513698	9	1.648048	16.5	1.817866
2	1.516979	9.5	1.660777	17	1.826087
2.5	1.521255	10	1.673537	17.5	1.833844
3	1.526515	10.5	1.686268	18	1.841158
3.5	1.532736	11	1.698897	18.5	1.848061
4	1.539887	11.5	1.711367	19	1.854591
4.5	1.54792	12	1.723626	19.5	1.860795
5	1.556777	12.5	1.735626	20	1.866724
5.5	1.566391	13	1.747318	20.5	1.872433
6	1.576685	13.5	1.758672	21	1.877975
6.5	1.587579	14	1.769646	21.5	1.883409
7	1.59899	14.5	1.780204	22	1.888796

Trimer Acrylic Acid (C-C Ion +2)

s	r	s	r	s	r
0	1.509778	7.5	1.487708	15	1.59946
0.5	1.502484	8	1.492803	15.5	1.606284
1	1.495958	8.5	1.498558	16	1.612758
1.5	1.490218	9	1.504922	16.5	1.618904
2	1.485286	9.5	1.511834	17	1.624753
2.5	1.481184	10	1.519227	17.5	1.630341
3	1.477932	10.5	1.527024	18	1.635712
3.5	1.475546	11	1.535139	18.5	1.640912
4	1.474044	11.5	1.543471	19	1.645972
4.5	1.473425	12	1.551916	19.5	1.650939
5	1.47369	12.5	1.560363	20	1.655819
5.5	1.474836	13	1.568706	20.5	1.660635
6	1.476845	13.5	1.57685	21	1.665398
6.5	1.479687	14	1.584723	21.5	1.670115
7	1.483322	14.5	1.592269	22	1.674789



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI MAULANA MALIK IBRAHIM MALANG
Jalan Gajayana Nomor 50, Telepon (0341)551354, Fax. (0341) 572533
Website: <http://www.uin-malang.ac.id> Email: info@uin-malang.ac.id

JURNAL BIMBINGAN SKRIPSI/TESIS/DISERTASI

IDENTITAS MAHASISWA

NIM : 220604110052
Nama : ANISA HAYATUN NUFUS RAHMAN
Fakultas : SAINS DAN TEKNOLOGI
Jurusan : FISIKA
Dosen Pembimbing 1 : KHUSNUL YAKIN, M.Si
Dosen Pembimbing 2 : Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA
Judul Skripsi/Tesis/Disertasi : Mekanisme Radiolisis Poly (Acrylic Acid) akibat Radiasi Gamma sebagai Aplikasi Drug Delivery System

IDENTITAS BIMBINGAN

No	Tanggal Bimbingan	Nama Pembimbing	Deskripsi Proses Bimbingan	Tahun Akademik	Status
1	15 Oktober 2025	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan Proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
2	13 November 2025	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan Proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
3	10 Desember 2025	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan Proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
4	11 Desember 2025	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan proposal sekaligus TTD untuk seminar proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
5	03 Februari 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Revisi Proposal	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
6	11 Maret 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan BAB IV	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
7	23 April 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan Penelitian	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
8	04 Mei 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan BAB IV	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
9	18 Mei 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan BAB IV	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
10	19 Mei 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan BAB IV	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
11	20 Mei 2026	KHUSNUL YAKIN, M.Si	Bimbingan BAB IV sekaligus TTD untuk seminar hasil	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
12	22 Mei 2026	Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA	Konsultasi Sub bab Integrasi	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi

Telah disetujui
Untuk mengajukan ujian Skripsi/Tesis/Desertasi

Dosen Pembimbing 2

Dr. UMAIYATUS SYARIFAH, MA

Malang, _____
Dosen Pembimbing 1

KHUSNUL YAKIN, M.Si

Kajur / Kaprodi
FARID SAMSU HANANTO, M.T