

PENELITIAN ASLI

PERHITUNGAN KAJIAN KOMPUTASI INTERAKSI ANTARA LOW-DENSITY POLYETHYLENE (LDPE) DENGAN POLIKAPROLAKTON (PCL)

Irfan Aldi¹, Muhammad Yusuf^{1*}, Rafiq Hani¹, Fitri Amorita Agritina Purba¹, Elly Maretha Samosir¹, Bella Junita Sari Br Tamba¹, Mhd. Aldy Rivaldi¹

¹Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Medan, Deli Serdang, Sumatera Utara, 20371, Indonesia

Info Artikel

Riwayat Artikel:

Tanggal Dikirim: 25 Agustus 2025

Tanggal Diterima: 03 November 2025

Tanggal Dipublish: 01 Desember 2025

Kata kunci: LDPE; PCL; interaksi molekuler; kimia komputasi; semi-empiris CNDO; energi interaksi

Penulis Korespondensi:

Muhammad Yusuf

Email: myusuf@unimed.ac.id

Abstrak

Penelitian ini menganalisis interaksi antara Low-Density Polyethylene (LDPE) dan Polikaprolakton (PCL) melalui kimia komputasi menggunakan metode semi-empiris CNDO. Optimasi geometri dan perhitungan energi interaksi (ΔE_{dimer}) dilakukan untuk menilai stabilitas dan reaktivitas kompleks senyawa yang terbentuk. Jarak antar atom H LDPE dengan atom O pada gugus hidroksil dan karbonil PCL masing-masing 3,09 Å dan 2,96 Å mengindikasikan interaksi non-kovalen seperti ikatan hidrogen dan gaya van der Waals. Muatan atom menunjukkan redistribusi elektron signifikan, menandakan tarikan elektrostatis kuat antar atom. Energi interaksi total -459,8 kJ/mol menunjukkan pembentukan kompleks yang spontan dan stabil. Temuan ini mendukung pengembangan material plastik yang lebih ramah lingkungan dengan meningkatkan sifat biodegradabilitas dan mekanik melalui pencampuran LDPE dan PCL. Studi ini menegaskan peran penting kimia komputasi dalam memprediksi sifat dan interaksi molekuler bahan polimer sebelum eksperimen laboratorium lebih lanjut.

Jurnal Kimia Saintek dan Pendidikan

e-ISSN: 2615-3378

Vol. 9 No.2 Desember, 2025 (Hal 41-47)

Homepage: <https://e-journal.sari-mutiara.ac.id/index.php/KIMIA/index>

DOI: <https://doi.org/10.51544/kimia.v9i2.6340>

How To Cite: Aldi, Irfan, Muhammad Yusuf, Rafiq Hani, Fitri Amorita Agritina Purba, Elly Maretha Samosir, Bella Junita Sari Br Tamba, and Mhd. Aldy Rivaldi. 2025. "Perhitungan Kajian Komputasi Interaksi Antara Low-Density Polyethylene (LDPE) Dengan Polikaprolakton (PCL)." *Jurnal Kimia Saintek Dan Pendidikan* 9 (2): 41–47. <https://doi.org/https://doi.org/10.51544/kimia.v9i2.6340>.



Copyright © 2025 by the Authors, Published by Program Studi: Kimia Fakultas Sain dan Teknologi Informasi Universitas Sari Mutiara Indonesia. This is an open access article under the CC BY-SA Licence ([Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/)).

1. Pendahuluan

Perkembangan teknologi mendorong inovasi di bidang kimia. Pemanfaatan perangkat lunak dan komputasi membantu peneliti memvisualisasikan dan menghitung fenomena kimia dengan lebih efisien dan akurat. (Paramita, dkk., 2020). Kimia komputasi memungkinkan analisis struktur molekul, optimasi geometri, dan prediksi sifat kimia dengan komputer. Kemajuan ini mempercepat penelitian dan meningkatkan akurasi. Kimia komputasi juga mengurangi potensi kesalahan eksperimen laboratorium konvensional. (Arifani, dkk., 2021).

Penggunaan komputer dalam kimia komputasi tidak hanya terbatas pada visualisasi struktur molekul, tetapi juga mencakup perhitungan sifat fisik dan kimia, simulasi interaksi antar molekul, hingga prediksi reaktivitas dan stabilitas senyawa. Salah satu perangkat lunak yang banyak digunakan dalam studi ini adalah Hyperchem, yang memfasilitasi pemodelan molekul secara tiga dimensi dan memungkinkan perhitungan energi serta optimasi struktur dengan metode semi-empiris (Amin & Oktaviani, 2025). Melalui pendekatan ini, para peneliti dapat memperoleh gambaran yang lebih jelas mengenai sifat-sifat molekul dan interaksi yang terjadi di antara bahan kimia sebelum melakukan eksperimen lebih lanjut di laboratorium.

Dalam konteks pengembangan material fungsional, penelitian mengenai interaksi antara Low-Density Polyethylene (LDPE) dan Polikaprolakton (PCL) menjadi sangat relevan. LDPE merupakan salah satu jenis plastik yang banyak digunakan dalam kehidupan sehari-hari, namun memiliki tingkat biodegradabilitas yang rendah sehingga berkontribusi terhadap permasalahan limbah plastik di lingkungan (Hartanto, 2025). Di sisi lain, PCL dikenal sebagai polimer biodegradable yang berpotensi meningkatkan sifat ramah lingkungan dari material plastik jika dikombinasikan dengan LDPE (Hanifa, dkk., 2024). Studi-studi sebelumnya menunjukkan bahwa pencampuran LDPE dengan PCL dapat meningkatkan sifat mekanis sekaligus mempercepat proses biodegradasi, sehingga menawarkan solusi yang menjanjikan untuk mengurangi dampak negatif limbah plastik.

Penelitian ini secara khusus bertujuan untuk melakukan kajian komputasi mengenai interaksi antara LDPE dan PCL dengan menggunakan metode semi-empiris CNDO. Melalui pendekatan ini, akan dihitung energi interaksi (ΔE_{dimer}) dari senyawa kompleks yang terbentuk. Hasil perhitungan ini diharapkan dapat memberikan informasi mendalam mengenai stabilitas dan potensi reaktivitas dari campuran LDPE-PCL, yang nantinya dapat menjadi dasar untuk pengembangan material plastik yang lebih ramah lingkungan dan memiliki sifat fungsional yang lebih baik. Secara keseluruhan, penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi signifikan dalam pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya dalam bidang material fungsional berbasis polimer. Dengan memanfaatkan pendekatan komputasi, hasil penelitian ini tidak hanya dapat memperkaya wawasan mengenai interaksi molekuler antara LDPE dan PCL, tetapi juga dapat menjadi referensi bagi penelitian lanjutan yang bertujuan untuk menciptakan material plastik yang lebih berkelanjutan dan mendukung upaya pelestarian lingkungan.

2. Metode

Adapun penelitian yang dilakukan mengikuti metode sebagai berikut:

2.1 Jenis Penelitian

Jenis penelitian yang dilakukan merupakan penelitian deskriptif kuantitatif. Karena penelitian deskriptif kuantitatif digunakan untuk memperoleh gambaran data verbal dan numerik melalui studi pustaka. Data dianalisis secara deskriptif dan disajikan dalam tabel dan grafik untuk memudahkan interpretasi. (Yusanto, 2020). Penelitian ini bertujuan menyajikan data mengenai jarak dan interaksi energi berdasarkan hasil perhitungan komputasi. Adapun metode penelitian yang digunakan adalah metode semiempiris CNDO.

2.2 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di laboratorium kimia, Universitas Negeri Medan yang beralamat di Jalan. Willem Iskandar Pasar V Medan Esatate Kabupaten Deli Serdang, Kota Medan, Sumatera Utara. Penelitian ini dimulai pada bulan Mei tahun 2025.

2.3 Target/Subjek Penelitian

Subjek pada penelitian ini adalah interaksi antara Low-Density Polyethylene (LDPE) dengan Polikaprolakton (PCL) dimana data ini diperlukan dalam perkembangan penelitian terkait senyawa kompleks

2.4 Prosedur

Instrumen yang digunakan dalam penelitian ini berupa perangkat keras (Hardware) dan perangkat lunak (Software). Perangkat keras berupa computer random access memory 4,00 GB, system type 64 bit operating system dan sistem operasi Windows 10. Perangkat lunak yang digunakan ialah Hyperchem Ver. 8.0 untuk menghitung molekul komputasi mencakup visualisasi molekul, optimasi geometri, membentuk interaksi molekul dan menghitung jarak kedua molekul.

Metodologi penelitian ini menerapkan pendekatan kimia komputasi untuk mempelajari interaksi antara Low-Density Polyethylene (LDPE) dan Polikaprolakton (PCL). Proses penelitian dilakukan secara komputasi menggunakan metode semi-empiris CNDO, dimulai dengan pemodelan senyawa LDPE dan PCL dalam bentuk ikatan hidrogen dengan tiga konformasi berbeda (1, 2, dan 3).

Tahap berikutnya mengatur jarak antara atom H pada gugus hidroksil dan atom O pada gugus karbonil sekitar 2 Å, dengan menyesuaikan posisi kedua senyawa menggunakan kombinasi Ctrl dan tombol panah. Kemudian, metode semi-empiris CNDO diterapkan melalui menu Setup untuk mengoptimasi struktur dimer Low-Density Polyethylene. Untuk memeriksa pembentukan ikatan hidrogen pada struktur yang teroptimasi, fitur recompute H bond diaktifkan pada menu Display, di mana ikatan hidrogen ditandai dengan garis putus-putus antara atom H dari gugus hidroksil dan atom O karbonil.

2.5 Data, Instrumen, dan Teknik Pengumpulan Data

Data yang diperoleh berupa data Jarak antara atom H dari LDPE dengan atom O yang berada pada posisi gugus hidroksil dan karbonil PCL, Serta muatan atom H dan O pada gugus hidroksil dan karbonil.

2.6 Teknik Analisis Data

Analisa data yang digunakan dalam penelitian ini ialah secara statistik dengan data yang dikumpulkan secara deskriptif kuantitatif. adapun data yang akan diperoleh yaitu sebagai berikut:

- $R_1(A)$: Jarak antara atom H dari LDPE dengan atom O yang berada pada posisi gugus hidroksil PCL
- $R_2(A)$: Jarak antara atom H dari LDPE dengan atom O yang berada pada posisi gugus karbonil PCL
- Muatan $H1.H2$: Muatan atom H dari LDPE yang berinteraksi dengan atom yang berada pada posisi gugus hidroxy (H1) dan gugus karbonil PCL (H2)
- Muatan $O1.O2$: Muatan atom O dari PCL pada posisi gugus hidroxy (O1) dan gugus karbonil (O2) PCL yang berinteraksi dengan atom H dari LDPE.

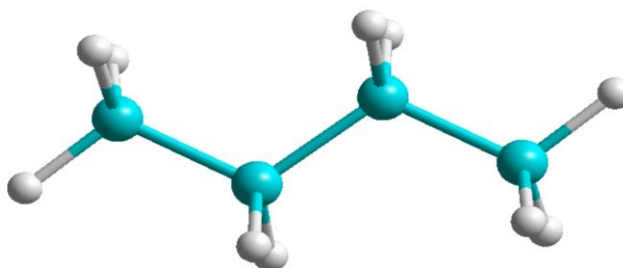
Dilakukan perhitungan pada percobaan yang telah dilakukan, untuk melakukan perhitungan energi interaksi (ΔE_{dimer}), Menggunakan rumus:

$$\Delta E = E_{Poliben} - (E_{LDPE} + E_{PCL})$$

- $E_{Poliben}$ = energi hasil optimasi dimmer Polyethylene
- E_{LDPE} = energi monomer karboksilat (1)
- E_{PCL} = energi monomer karboksilat (2)

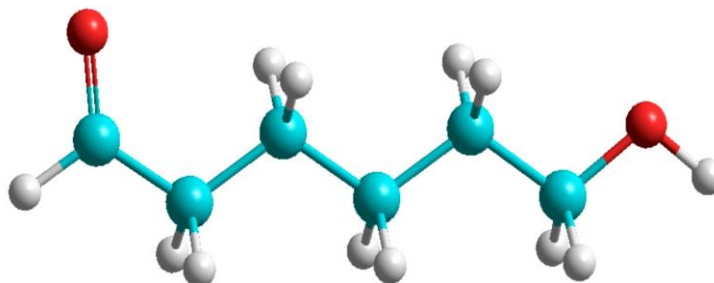
3. Hasil

Struktur molekul Low-Density Polyethylene (LDPE) pada Gambar 1. Dan struktur molekul Polikaprolakton pada Gambar 2. Dibuat dengan model builder yaitu Hyperchem.



Gambar 1. Struktur dimmer molekul Low-Density Polyethylene (LDPE)

Optimasi geometri dilakukan menggunakan metode semiempiris CNDO hingga diperoleh bentuk yang paling stabil dengan energi minimum.



Gambar 2. Struktur dimmer molekul Polikaprolakton (PCL)

Visualisasi hasil optimasi dari PCL berada dekat dengan atom oksigen dari gugus hidrkoksi dan karbonil PCL. Kedekatan antar molekul ini mengindikasikan adanya potensi interaksi antarmolekul yang bersifat non kovalen

Perhitungan muatan atom sebelum dan sesudah interaksi menunjukkan adanya redistribusi elektron. Atom H1 pada LDPE menunjukkan muatan -0.032, sedangkan O1 dari gugus hidroksi PCL 0.242. Begitu juga dengan pasangan H2 -0.017 dan O2 dari karbonil PCL 0.514. Perbedaan muatan ini menghasilkan Δ muatan sebesar 0.210 dan 0.497 secara berturut-turut. Adapun data yang didapatkan pada interaksi molekul sebagai berikut:

Tabel 1. Jarak dan interaksi energi LDPE dengan PCI

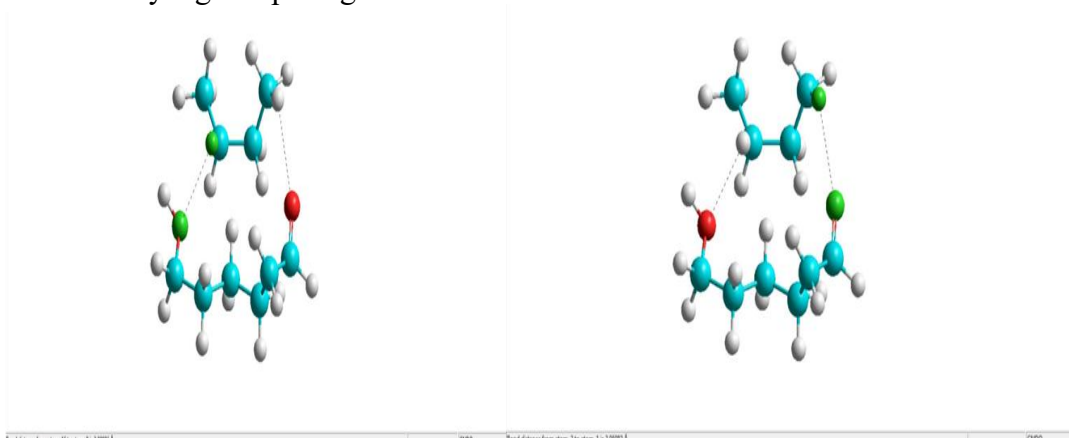
Poliblen	R1 (A)	Muatan H ₁	Muatan O ₁	Muatan Delta H ₁ -O ₁	R2 (A)	Muatan H ₂	Muatan O ₂	Muatan Delta H ₂ -O ₂	Energi (kcal/mol)
LDPE/PC 1	3.0 9	0.032	0.242	0.210	2.96	0.017	0.514	0.497	-82757

Perubahan muatan ini mengindikasikan adanya tarikan elektrostatis antara pasangan atom. Menurut (Ni'mah et al.,2025) , perubahan muatan lokal menunjukkan terbentuknya gaya tarik non kovalen seperti dipol-pol dan van der Waals.

4. Pembahasan

Pembahasan Panjang Ikatan

Jarak antara H1 dan O1 sebesar 3.09 Å sedangkan jarak H2 dan O2 sebesar 2.96 Å. panjang interaksi ini termasuk dalam kisaran interaksi lemah non- kovalen (2.3-3.0)Å yang tepat untuk ikatan van der Waals atau hidrogen lemah yang menunjukkan jarak antar atom yang ada pada gambar 3.



Gambar 3. Jarak antar atom pada struktur LDPE-PCL

Panjang jarak ini menandakan tidak terbentuknya ikatan kovalen baru, melainkan interaksi fisik yang bersifat tarik menarik. Berdasarkan data panjang ikatan, distribusi muatan, dan tidak adanya ikatan baru yang terbentuk, interaksi yang terjadi antara LDPE-PCL dikategorikan sebagai gaya van der Waals. Menurut (Putra et al.,2025) menyatakan bahwa sistem dengan energi negatif namun juga tidak menunjukkan pembentukan ikatan kovalen dapat diklasifikasikan sebagai interaksi van der Waals.

Pembahasan Energi Interaksi

Energi total sistem LDPE-PCL hasil optimasi adalah -82757 kcal/mol, sedangkan total energi LDPE dan PCL dalam keadaan bebas lebih tinggi. Perhitungan energi interaksi sebagai berikut:

$$\Delta E = E_{\text{Polimer}} - (E_{\text{LDPE}} + E_{\text{PCL}})$$

$$\Delta E = -82757 - (-32486 + -50161)$$

$$\Delta E = -82757 - (-82.647)$$

$$\Delta E = -110 \text{ kkal.Mol} \times 4.18$$

$$\Delta E = -459,8 \text{ KJ/Mol}$$

Data ini menunjukkan bahwa pembentukan kompleks terjadi secara spontan dan stabil secara termodinamika.

Interaksi antara LDPE-PCL ini menghasilkan sistem poliblend yang lebih kompatibel dan fleksibel dibandingkan dengan polimer murni itu sendiri. Hal ini terjadi karena adanya gaya tarik antarmolekul yang menjaga stabilitas antar rantai polimer. Menurut Yusuf dkk, (2023) dalam penelitiannya terhadap PCL-PP yang menunjukkan bahwa campuran poliblend Semacam ini akan meningkatkan kekuatan tarik dan kelenturan dibandingkan polimer murni. Maka, dapat diasumsikan bahwa interaksi LDPE-PCL juga berkontribusi terhadap peningkatan sifat mekanik sistem.

Muatan atom H dan O cenderung lebih netral dan jarak antar atom lebih acak. Setelah interaksi, muatan menjadi lebih ekstrem dan jarak antar atom menjadi lebih spesifik. Panjang ikatan H₁-O₁ dan H₂-O₂ juga sedikit berbeda karena perbedaan ukuran molekul dan distribusi muatan lokal.

Muatan atom H dan O cenderung lebih netral dan jarak antar atom lebih acak. Setelah interaksi, muatan menjadi lebih ekstrem dan jarak antar atom menjadi lebih spesifik. Panjang ikatan H₁-O₁ dan H₂-O₂ juga sedikit berbeda karena perbedaan ukuran molekul dan distribusi muatan lokal.

5. Kesimpulan

Jenis interaksi yang didapatkan berdasarkan data yang diperoleh adalah interaksi ikatan hidrogen. Hal ini didukung oleh jarak atom H dari LDPE dengan atom O pada gugus hidroksil dan karbonil PCL yang relatif pendek (3,09 Å dan 2,96 Å), serta perbedaan muatan yang cukup besar antara H dan O (Δ muatan sebesar 0,210 dan 0,497), yang menunjukkan adanya tarik-menarik elektrostatik kuat antara atom-atom tersebut. Energi interaksi yang sangat negatif (-82757 kcal/mol) memperkuat kesimpulan bahwa ikatan hidrogen berkontribusi besar dalam menstabilkan interaksi antara LDPE dan PCL, sehingga interaksi ini menjadi dominan dalam sistem tersebut.

6. Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada LPPM UNIMED dan DRTPM DIKTI yang telah membantu dana penelitian melalui Hibah Student Grant dengan No.Kontrak :0082/UN33.8/PPKM/PSG/2025 dibiayai oleh dana PNBP Universitas Negeri Medan Tahun Anggaran 2025 dengan Nomor:0194/UN33/KPT/2025. Serta penulis juga mengucapkan terima kasih kepada Kemendikisaintek RI atas pendanaan sebagian penelitian ini yang bersumber dari dana DIPA DPPM NO. SP DIPA - 139.04.1.693320/2025

7. Referensi

- [1] Amin, S., & Oktaviani, R. A. (2025). Review Artikel: Aplikasi Kimia Komputasi Dalam Hubungan Struktur Aktivitas Senyawa Analog Turunan Quinolin Dari Cinchona Ledgeriana Moens Sebagai Antimalaria. *Journal of Public Health Science*, 2(2), 166-172.
- [2] Arifani, D. Y. M., Savalas, L. R. T., Ananto, A. D., Junaidi, E., & Hadisaputra, S. (2021). Pengembangan Modul Praktikum Kimia Berbasis Kimia Komputasi Pada Materi Asam Basa. *Prosiding SAINTEK*, 3(1), 660-666.
- [3] Hanifa, K., Suprihanto, A., & Haryadi, G. D. (2024). Pengaruh persentase flake polylactic acid (pla) terhadap densitas campuran biodegradable polymer PLA dengan polycaprolactone (PCL) menggunakan metode solvent casting. *Jurnal Teknik Mesin*, 12(2), 71-76.
- [4] Hartanto, F. S. (2025). Pencemaran Limbah Plastik Dan Upaya Pengelolaan Lingkungan Berkelanjutan Di Kota Pekanbaru. *Jurnal Senpling Multidisiplin Indonesia*, 3(1), 14-26. Yusanto, Y. (2020). Ragam pendekatan penelitian kualitatif. *Journal of scientific communication (jsc)*, 1(1), 1-13.
- [5] Ni'mah, F., Sari, A. R. P., Anggraeni, M. E., & Theasy, Y. (2024). Analisis Kualitatif Kesalahan Konseptual Senyawa Ionik dan Senyawa Kovalen dalam Argumentasi Mahasiswa pada Laporan Praktikum Kimia Dasar. *Jurnal Ilmiah Kanderang Tingang*, 15(2), 343-358.
- [6] Paramita, S., Maylani Permata, S., Eva Vaulina, Y. D., & Nasrokhah, P. I. (2020). Pemilihan Metode Perhitungan Kimia Komputasi Semi-empiris untuk Pengembangan 1,3,4- Thiadiazole. *Indonesian Journal of Chemical Research*, 8(1), 51-56
- [7] Permono, A. (2018). *Mengenal polimer dan polimerisasi*. UGM PRESS: Yogyakarta.
- [8] Priani, S. E., & Fakih, T. M. (2021). Studi interaksi molekular senyawa hesperidin dan nobiletin dari kulit buah jeruk terhadap enzim tyrosinase secara in silico. *Jurnal Ilmiah Farmasi Farmasyifa*, 4(1), 17-24.
- [9] Putra, A. G., Muda, I., Pawawoi, P., Ikaningsih, M. A., Prajitno, D. H., Martijanti, M., & Chandrasari, A. Z. (2025). *Pengantar Material Teknik*. Agam: Yayasan Tri Edukasi Ilmiah.
- [10] Yusanto, Y. (2020). Ragam pendekatan penelitian kualitatif. *Journal of scientific communication (jsc)*, 1(1), 1-13.
- [11] Yusuf, M., & Nasution, A. K. (2022). An ab initio study of the reaction mechanism of 2-methylbenzaldehyde acetalization with methanol. *J. Pendidik. Kim*, 14, 105-110.
- [12] Yusuf, M., Octaviani, P., & Rafsanjani, M. B. (2023). Studi perhitungan celah energi senyawa kompleks bis (benzoiotrifluoroaseton) zirkonium dengan menggunakan metode semi-empiris pm3. *Einstein E-Journal*, 11(1), 10-15.