

PEMODELAN SUPRAMOLEKUL KITOSAN TERCETAK *TRANS*-RESVERATROL MENGGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Ervan Yudha
18/427616/PA/18576

INTISARI

Pemodelan bentuk supramolekuler dari kitosan tercetak secara molekul (*molecularly imprinted chitosan*, MIC) untuk senyawa templat *trans*-resveratrol telah dilakukan dengan menggunakan *density functional theory* (DFT). Validasi metode optimasi geometri untuk pemodelan dilakukan menggunakan metode DFT/B3LYP dengan variasi himpunan basis. Model kompleks rongga MIC dan *trans*-resveratrol dibuat variasi sebanyak 8 konfigurasi yang berbeda. Semua model kompleks tersebut dioptimasi menggunakan metode komputasi yang telah dipilih. Model kompleks teroptimasi tersebut dihitung energi interaksi dan dianalisis interaksi non-kovalen yang terjadi antara rongga MIC dan *trans*-resveratrol. Rongga MIC dari model kompleks paling stabil digunakan untuk melihat afinitas dan selektivitas terhadap *cis*-resveratrol.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa metode komputasi DFT/B3LYP/6-31G(d) dapat digunakan untuk memodelkan interaksi antara kitosan tercetak secara molekul dengan *trans*-resveratrol. Hasil pemodelan menunjukkan bahwa model kompleks B1 merupakan model kompleks paling stabil karena memiliki energi interaksi relatif paling rendah sebesar -199 kJ/mol dan membentuk 4 ikatan hidrogen yang memiliki panjang ikatan sekitar 1,79–1,91 Å. Model kompleks ini memiliki rongga MIC dengan afinitas dan selektivitas yang lebih tinggi terhadap *trans*-resveratrol dibandingkan dengan *cis*-resveratrol.

Kata kunci: *Density functional theory*, kitosan, pemodelan, polimer tercetak secara molekul, *trans*-resveratrol

MODELING OF SUPRAMOLECULAR OF *TRANS*-RESVERATROL IMPRINTED CHITOSAN USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Ervan Yudha
18/427616/PA/18576

ABSTRACT

Modeling the supramolecular shape of molecularly imprinted chitosan (MIC) for the template compound *trans*-resveratrol has been carried out using density functional theory (DFT). The validation method of the geometry optimization for modeling was carried out using the DFT/B3LYP method with a variety of basis sets. The complex models of MIC cavity and *trans*-resveratrol were varied in 8 different configurations. All these complex models are optimized using the selected computational method. The optimized complex models were calculated the interaction energy and analyzed the non-covalent interaction that occur between the MIC cavity and *trans*-resveratrol. The MIC cavity of the most stable complex model was used to determine the affinity and selectivity for *cis*-resveratrol. The results showed that the DFT/B3LYP/6-31G(d) computational method can be used to model the interaction between molecularly imprinted chitosan and *trans*-resveratrol. The modeling results show that B1 complex model is the most stable complex model because it has the lowest relative interaction energy of -199 kJ/mol and forms 4 hydrogen bonds with a bond length of around 1.79-1.91 Å. This complex model has a MIC cavity with higher affinity and selectivity for *trans*-resveratrol compared to *cis*-resveratrol.

Keywords: Chitosan, density functional theory, modeling, molecularly imprinted polymer, *trans*-resveratrol