

PEMODELAN POLIMER TERCETAK MOLEKUL BERBASIS KITOSAN DENGAN TEMPLAT QUERCETIN MENGGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Maharani Alya Zahrani
18/427633/PA/18593

INTISARI

Penelitian mengenai pemodelan polimer tercetak molekul (MIP) berbasis kitosan dengan templat quercetin telah dilakukan menggunakan metode *density functional theory*. Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui model interaksi rongga MIP dengan templat quercetin sehingga diperoleh model rongga MIP dengan afinitas dan selektivitas yang tinggi terhadap templat quercetin.

Penelitian diawali dengan validasi metode komputasi DFT/B3LYP dengan variasi himpunan basis. Himpunan basis terbaik digunakan untuk melakukan optimasi geometri dalam pemodelan kompleks MIP dengan templat quercetin. Energi interaksi kompleks teroptimasi dihitung serta dilakukan analisis interaksi non-kovalen yang terjadi antara rongga MIP dengan quercetin untuk mengetahui afinitas dan selektivitas rongga MIP terhadap quercetin.

Hasil validasi metode komputasi menunjukkan metode DFT/B3LYP dengan himpunan basis 6-31G(d) dapat digunakan dalam pemodelan MIP berbasis kitosan dengan templat quercetin. Hasil dari pemodelan diperoleh kompleks A4 merupakan model kompleks MIP berbasis kitosan dengan templat quercetin yang paling stabil dengan energi interaksi paling rendah yaitu -230 kJ/mol. Interaksi non-kovalen yang terbentuk pada model kompleks ini mencakup 3 ikatan hidrogen dan interaksi non-kovalen lainnya. Dengan demikian rongga MIP pada model kompleks A4 ini memiliki afinitas dan selektivitas yang tinggi terhadap molekul templat quercetin.

Kata kunci: *density functional theory*, kitosan, komputasi, polimer tercetak molekul, quercetin.

MODELING OF CHITOSAN-BASED MOLECULAR IMPRINTED POLYMER WITH QUERCETIN AS TEMPLATE USING DENSITY FUNCTION THEORY

Maharani Alya Zahrani
18/427633/PA/18593

ABSTRACT

Modeling of chitosan-based molecularly imprinted polymer (MIP) with quercetin template has been conducted using density function theory method. This study was conducted to determine the interaction model of MIP cavities with quercetin templates to obtain MIP cavity models with high affinity and selectivity to quercetin templates.

The research began with the computational method validating of DFT/B3LYP with variety of basis sets. The best basis set was used to perform geometry optimization in modeling the MIP complex with quercetin template. The interaction energy of the optimized complex was calculated and the non-covalent interaction between the MIP cavity and quercetin was analyzed to determine the affinity and selectivity of the MIP cavity to quercetin.

The computational method validating results shows that the DFT/B3LYP method with the 6-31G(d) basis set can be used in modeling chitosan-based MIP with quercetin templates. The results of the modeling obtained complex A4 is the most stable chitosan-based MIP complex model with quercetin template with the lowest interaction energy, which is -230 kJ/mol. The non-covalent interactions formed in this complex model include 3 hydrogen bonds and other non-covalent interactions. So that the MIP cavity in this A4 complex model has a high affinity and selectivity for quercetin template molecules.

Keywords: chitosan, computation, density functional theory, molecularly imprinted polymer, quercetin.