

**PEMODELAN POLIMER BERBASIS KITOSAN TERCETAK MOLEKUL
TEMPLAT *INDOLE-3-ACETIC ACID* DAN *1-NAPHTHALENEACETIC
ACID* MENGGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Oktavia Suryani Nasution
21/476927/PA/20617

INTISARI

Pada penelitian ini, dilakukan pemodelan polimer tercetak molekul (MIP) dengan monomer fungsional kitosan terhadap templat *Indole-3-acetic acid* (IAA) dan *1-naphthaleneacetic acid* (NAA) menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk memperoleh model MIP kitosan tercetak molekul IAA dan NAA yang paling stabil. Selain itu, dengan penelitian ini maka dapat diketahui jenis interaksi non-kovalen yang terdapat pada kompleks MIP kitosan-IAA dan MIP kitosan-NAA.

Validasi metode DFT/B3LYP dilakukan dengan 3 variasi himpunan basis yaitu def2-SVP, def2-TZVP, dan def2-TZVP(-f). Terdapat 4 model kompleks yang dimodelkan untuk masing-masing templat IAA dan NAA. Energi kompleks dan *single point energy* dari setiap model dihitung pada pelarut air sehingga diperoleh nilai energi interaksi. Interaksi non-kovalen yang terjadi antara MIP dengan templat dianalisis dengan metode *Independent Gradient Model based on Hirshfeld Partition* (IGMH) dan kekuatan interaksi diukur berdasarkan nilai *Bond Strength Index for Weak Interaction* (IBSIW). Analisis *absorption, distribution, metabolism, excretion* (ADMET) dilakukan pada model MIP paling stabil untuk mengevaluasi kompleks MIP sebagai lepas-lambat zat pengatur tumbuh (SR-ZPT).

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, metode komputasi yang digunakan yaitu DFT/B3LYP/def2-TZVP(-f). Model MIP kitosan-IAA yang paling stabil yaitu tetramer_A dengan volume rongga sebesar 255,54 Å³ dan energi interaksi sebesar -32,03 kkal/mol. Model MIP kitosan-NAA yang paling stabil yaitu tetramer_B dengan volume rongga sebesar 218,03 Å³ dan energi interaksi sebesar -33,76 kkal/mol. Setiap model MIP yang dirancang dapat berikatan dengan IAA maupun NAA dan membentuk ikatan hidrogen maupun gaya van der Waals. Pengikatan IAA dan NAA ke MIP kitosan menghasilkan kompleks yang dapat digunakan sebagai SR-ZPT.

Kata kunci: auksin, DFT, kitosan, pemodelan molekul.

MODELING OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMERS BASED ON CHITOSAN WITH INDOLE-3-ACETIC ACID AND 1-NAPHTHALENEACETIC ACID TEMPLATS USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Oktavia Suryani Nasution
21/476927/PA/20617

ABSTRACT

In this study, molecularly imprinted polymer (MIP) modeling was performed using chitosan as a functional monomer for the templates Indole-3-acetic acid (IAA) and 1-naphthaleneacetic acid (NAA) based on Density Functional Theory (DFT) calculations. The aim of this research was to determine the most stable chitosan-based MIP models for IAA and NAA. Furthermore, this study also identifies the types of non-covalent interactions present in the chitosan-IAA and chitosan-NAA MIP complexes.

The DFT/B3LYP method was validated with three variations of basis sets: def2-SVP, def2-TZVP, and def2-TZVP(-f). Four complex models were modeled for each of the IAA and NAA templates. The complex energies and single-point energies for each model were calculated, yielding the interaction energy values. The non-covalent interactions between the MIP and the templates were analyzed using the Independent Gradient Model based on Hirshfeld Partition (IGMH), while interaction strength was evaluated based on the Bond Strength Index for Weak Interaction (IBSIW). An absorption, distribution, metabolism, and excretion (ADMET) analysis was conducted on the most stable MIP model to evaluate its potential as a slow-release plant growth regulator (SR-PGR).

Based on the study, the most suitable computational method was DFT/B3LYP/def2-TZVP(-f). The most stable chitosan-IAA MIP model was tetramer_A, with a cavity volume of 255.54 Å³ and an interaction energy of -32.03 kcal/mol. The most stable chitosan-NAA MIP model was tetramer_B, with a cavity volume of 218.03 Å³ and an interaction energy of -33.76 kcal/mol. Each designed MIP model was capable of binding to IAA and NAA through hydrogen bonding and van der Waals interactions. The binding of IAA and NAA to chitosan-based MIP has produced a MIP complex that can be utilized as an SR-PGR.

Keywords: auxin, chitosan, DFT, molecular modeling.