UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**Pemodelan Struktur Molecularly Imprinted Chitosan dengan Templat Paclobutrazol dan Asam Giberelat
menggunakan Density Functional Theory**
Fahrezy Thomas Pratama, Drs. Iqmal Tahir, M.Si
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

PEMODELAN STRUKTUR MOLECULARLY IMPRINTED CHITOSAN DENGAN TEMPLAT PACLOBUTRAZOL DAN ASAM GIBERELAT MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Fahrezy Thomas Pratama
22/499299/PA/21538

INTISARI

Telah dilakukan penelitian kimia komputasi terhadap pemodelan struktur *molecularly imprinted chitosan* dengan templat paclobutrazol (PBZ) dan asam giberelat (GA_3) menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT). Tujuan penelitian ini untuk memperoleh model rongga *Molecularly Imprinted Chitosan* (MIP) berbasis kitosan yang paling stabil, menentukan jenis dan karakteristik interaksi non-kovalen, dan menganalisis energi interaksi kompleks MIP kitosan-templat untuk mengevaluasi kestabilan sistem pelepasan zat pengatur tumbuh secara terkendali.

Penelitian diawali dengan validasi metode terhadap struktur PBZ, GA_3, dan kitosan dimer menggunakan DFT/B3LYP-D3BJ dengan variasi basis def2-SVP, def2-TZVP, dan def2-TZVP(-f). Hasil validasi menunjukkan def2-TZVP(-f) dapat digunakan sebagai metode yang representatif untuk pemodelan MIP. Pemodelan MIP disusun dari dua rantai kitosan pentamer dan heksamer yang dihubungkan oleh glutaraldehida sebagai penaut silang dengan orientasi searah dan berlawanan arah. Setiap kompleks MIP-templat dioptimasi menggunakan ORCA 6.1.1, kemudian dianalisis volume rongganya menggunakan Molovol. Energi interaksi dihitung melalui perhitungan *single point energy* dengan model pelarut CPCM air. Analisis interaksi non-kovalen dilakukan menggunakan metode IGMH melalui perangkat lunak Multiwfn dan divisualisasikan menggunakan VMD.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa model heksamer_A merupakan model MIP kitosan paling stabil untuk PBZ dengan energi interaksi sebesar -130,30 kJ mol^{-1} dan volume rongga sebesar 288,33 $Å^3$ yang didukung oleh terbentuknya ikatan hidrogen kuat H117…N300 dengan nilai IBSIW sebesar 3,30 a.u./$Å^2$. Pada templat GA_3, model heksamer_B menunjukkan kestabilan paling tinggi dengan energi interaksi sebesar -192,24 kJ mol^{-1} dan volume rongga sebesar 456,80 $Å^3$ yang ditunjukkan oleh ikatan hidrogen H343…N173 dengan nilai IBSIW sebesar 6,38 a.u./$Å^2$. Berdasarkan hasil tersebut, kestabilan MIP dipengaruhi oleh kesesuaian volume rongga, orientasi templat, distribusi gugus aktif, dan kekuatan interaksi non-kovalen yang terbentuk. Dengan demikian, model heksamer_A dan heksamer_B masing-masing menjadi model MIP kitosan yang paling potensial untuk pengikatan PBZ dan GA_3.

Kata kunci: asam giberelat, DFT, glutaraldehida, kitosan, paclobutrazol

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**Pemodelan Struktur Molecularly Imprinted Chitosan dengan Templat Paclobutrazol dan Asam Giberelat
menggunakan Density Functional Theory**
Fahrezy Thomas Pratama, Drs. Iqmal Tahir, M.Si
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

STRUCTURAL MODELING OF MOLECULARLY IMPRINTED CHITOSAN WITH PACLOBUTRAZOL AND GIBBERELLIC ACID AS TEMPLATES USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Fahrezy Thomas Pratama
22/499299/PA/21538

ABSTRACT

A computational chemistry study was conducted on the structural modeling of chitosan-based Molecularly Imprinted Polymer (MIP) using paclobutrazol (PBZ) and gibberellic acid (GA_3) as template molecules using the Density Functional Theory (DFT) approach. This study aimed to obtain the most stable MIP cavity model, determine the types and characteristics of non-covalent interactions, and analyze the interaction energy of chitosan-based MIP-template complexes to evaluate the stability of the controlled-release system for plant growth regulators.

The study began with computational method validation on PBZ, GA_3, and chitosan dimer structures using DFT/B3LYP-D3BJ with def2-SVP, def2-TZVP, and def2-TZVP(-f) basis set variations. The validation results showed that def2-TZVP(-f) could be used as a representative method for MIP modeling. The MIP models were constructed from two chains of chitosan pentamer and hexamer connected by glutaraldehyde as a crosslinking agent in parallel and antiparallel orientations. Each MIP-template complex was optimized using ORCA 6.1.1, and its cavity volume was analyzed using Molovol. The interaction energy was calculated through single point energy calculations with the CPCM water solvent model. Non-covalent interactions were analyzed using the IGMH method through Multiwfn and visualized using VMD.

The results showed that the hexamer_A model was the most stable chitosan-based MIP model for PBZ, with an interaction energy of -130.30 kJ mol^{-1} and cavity volume of 288.33 $Å^3$, supported by the formation of a strong H117…N300 hydrogen bond with an IBSIW value of 3.30 a.u./$Å^2$. For the GA_3 template, the hexamer_B model showed the highest stability, with an interaction energy of -192.24 kJ mol^{-1} and a cavity volume 456.80 $Å^3$, indicated by the H343…N173 hydrogen bond with an IBSIW value of 6.38 a.u./$Å^2$. Based on these results, MIP stability was influenced by cavity volume compatibility, template orientation, active group distribution, and the strength of the non-covalent interactions formed. Therefore, hexamer_A and hexamer_B are the most promising chitosan-based MIP models for PBZ and GA_3 binding, respectively.

Keywords: chitosan, DFT, gibberellic acid, glutaraldehyde, paclobutrazol