

RANCANGAN BERBANTUAN KOMPUTER UNTUK POLIMER TERCETAK MOLEKUL ARTEMISININ BERDASARKAN PEMODELAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL

Nur Afifah Jamilah
14/364171/PA/15929

INTISARI

Rancangan berbantuan komputer untuk polimer tercetak molekul (*Molecularly Imprinted Polymer*, MIP) artemisinin (*Artemisia annua L.*) berdasarkan pemodelan dan simulasi dinamika molekul telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mengetahui rasio optimum antara templat artemisinin dan asam metakrilat sebagai monomer fungsional serta mempelajari ikatan hidrogen yang terjadi antara templat artemisinin dan asam metakrilat selama waktu simulasi.

Penelitian ini diawali dengan optimasi geometri masing-masing struktur molekul komponen MIP meliputi artemisinin sebagai templat, asam metakrilat (MAA) sebagai monomer fungsional, etilen glikol dimetakrilat sebagai monomer taut silang, azobisisobutironitril sebagai inisiator, dan kloroform sebagai pelarut. Pemodelan dilakukan dengan menggunakan perhitungan semiempirik PM3. Perhitungan energi interaksi antara artemisinin dengan asam metakrilat dilakukan pada beberapa variasi rasio. Pada simulasi dinamika molekul seluruh komponen pembentuk MIP dimasukkan dalam kotak simulasi selama 5 ns.

Hasil perhitungan pemodelan dan simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa rasio optimum artemisinin:MAA adalah 1:2. Energi interaksi yang didapatkan dari pemodelan sebesar -6,472 kkal/mol dan terdapat dua ikatan hidrogen pada simulasi dinamika molekul dengan nilai okupansi sebesar 19,85 % pada jarak 2,762 Å dan sudut 48,97°.

Kata kunci: artemisinin, pemodelan, polimer tercetak molekul, simulasi dinamika molekul.

COMPUTER AIDED DESIGN OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER OF ARTEMISININ BASED ON MODELING AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Nur Afifah Jamilah
14/364171/PA/15929

ABSTRACT

Computer aided design of molecularly imprinted polymer (MIP) of artemisinin (*Artemisia annua L.*) based on modeling and molecular dynamic simulation has been conducted. This research was purposed to determine the optimum ratio between artemisinin as template and methacrylic acid as functional monomer and to investigate the phenomenon of hydrogen bonding that occurred between artemisinin and methacrylic acid during the simulation.

This research was begun by geometry optimizing for each molecule component of MIP including artemisinin as template, methacrylic acid (MAA) as functional monomer, ethylene glycol dimethacrylate as crosslinker monomer, 2,2-azobis(isobutironitrile) as initiator and chloroform as solvent. Modeling was carried out by using semiempirical PM3 calculation. The calculation of interaction energy between artemisinin and methacrylic acid was performed at several ratio. In the molecular dynamic simulation all component of MIP formation was inserted into the simulation box simulation during 5 ns.

The results of modeling and molecular dynamic simulation showed that the optimal ratio of artemisinin:MAA was 1:2. The interaction energy from the modeling was -6.472 kcal/mol and there were two hydrogen bonds occurred in the molecular dynamic simulation with the occupancy value of 19.85% at distance 2.762 Å and angle 48.97°.

Keywords: artemisinin, modeling, molecular dynamic simulation, molecularly imprinted polymer