

**RANCANGAN BERBANTUAN KOMPUTER UNTUK
POLIMER TERCETAK MOLEKUL SITOKININ
BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

EDY SUDRAJAT
13/353351/PA/15717

INTISARI

Rancangan berbantuan komputer untuk polimer tercetak molekul (*Molecularly Imprinted Polymer/ MIP*) dengan senyawa tercetak sitokinin telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan rasio mol optimal antara sitokinin dan monomer fungsional asam metakrilat (*methacrylic acid /MAA*) untuk rekomendasi sintesis MIP sitokinin. Penelitian menggunakan pemodelan teori kerapatan fungsional (*density functional theory/ DFT*) pada efek PCM (*polarizable continuum model*) dan simulasi dinamika molekul. Penentuan rasio optimal berdasarkan DFT dilakukan dengan menginteraksikan situs ikatan hidrogen hanya pada sitokinin dan MAA sehingga didapatkan energi interaksi hidrogen dan energi interaksi hidrogen termodifikasi pada berbagai rasio. Pada simulasi dinamika molekul dipelajari semua komponen pada sistem MIP yaitu sitokinin, MAA, EGDMA (etilen glikol dimetakrilat) sebagai monomer penaut silang, AIBN (2,2-azobis(isobutironitril)) sebagai inisiator dan kloroform sebagai pelarut. Semua senyawa dimasukkan pada kotak simulasi berbentuk kubus dengan rusuk 70Å. Pada kotak simulasi dilakukan minimasi energi, pemanasan dengan *ensemble* NVE dan ekuilibrasi dengan *ensemble* NpT. Simulasi dilakukan selama 5000 ps pada *ensemble* NVT kemudian dilakukan analisis ikatan hidrogen. Berdasarkan hasil pemodelan DFT dan simulasi dinamika molekul diusulkan rasio optimal MIP dengan senyawa tercetak sitokinin dengan perbandingan 1:3.

Kata Kunci : model kontinum terpolarisasi, polimer tercetak molekul, simulasi dinamika molekul, sitokinin, teori kerapatan fungsional

COMPUTER AIDED DESIGN OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER OF CYTOKININ BASED ON MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION

EDY SUDRAJAT

13/353351/PA/15717

ABSTRACT

Computational research to design molecularly imprinted polymer (MIP) of cytokinin has been done. This research aimed to determine the optimum ratio between cytokinin as template and *Methacrylic Acid* (MAA) as functional monomer. The research was performed by using density functional theory (DFT) modelling and molecular dynamic simulation. Optimum ratio was determined based on DFT model. It was done by interacting the binding-site of cytokinin with MAA that resulting binding energy and modified binding energy in various ratios. Molecular dynamic simulation on the other hand include all components of MIP system which were cytokinin, MAA, EGDMA (ethylene glycol dimethacrylate) as crosslinker monomer, AIBN (2,2-azobis(isobutyronitrile)) as radical inisiator and chloroform as porogenic solvent. All components were prepared in simulation box by egde size 70 Å. The system was minimized for energy, heated in NVE ensemble and equilibrated in NpT ensemble. The simulation completed for 5000 ps in NVT ensemble then analyzed for its hydrogen binding. Based on both methods the optimum mole ratio of cytokinin : MAA was 1:3.

Keywords : cytokinin, density functional theory, molecular dynamic simulation, molecularly imprinted polymer, polarizable continuum model