

**PEMODELAN DAN SIMULASI UNTUK RANCANGAN POLIMER
TERCETAK MOLEKUL BRAZILEIN DENGAN ASAM METAKRILAT
SEBAGAI MONOMER FUNGSIONAL**

Faqih Abdurrahman
14/364419/PA/15989

INTISARI

Penelitian mengenai rancangan sintesis polimer tercetak molekul brazilein dengan metode komputasi menggunakan pemodelan dan simulasi dinamika molekular telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mengetahui rasio optimum brazilein:asam metakrilat serta mempelajari dinamika ikatan hidrogen yang terjadi selama proses sintesis.

Kajian pemodelan menggunakan perhitungan mekanika kuantum DFT/B3LYP dengan *basis set* 6-31G(d) sedangkan simulasi dinamika molekular menggunakan AMBER. Penelitian ini diawali dengan optimasi struktur templat brazilein, monomer fungsional asam metakrilat, monomer taut silang etilen glikol dimetakrilat, dan inisiator 2,2'-azobis(isobutironitril) dalam sistem pelarut kloroform. Kemudian pemodelan kompleks brazilein dan asam metakrilat dilakukan dalam rasio 1:1, 1:2, 1:3, 1:4, dan 1:5 untuk mendapatkan energi interaksi kompleks. Selanjutnya, simulasi dinamika molekular dilakukan dalam kotak simulasi yang telah diminimisasi energi dan diekuilibrasi untuk mendapatkan data dinamika ikatan hidrogen selama 5 ns simulasi.

Hasil perhitungan mekanika kuantum kompleks brazilein dengan asam metakrilat menunjukkan rasio optimum kompleks adalah 1:4 dengan energi interaksi sebesar -47,247 kkal/mol. Hasil simulasi dinamika molekular menunjukkan interaksi efektif hanya terjadi pada 3 asam metakrilat dengan jumlah ikatan hidrogen sebanyak 4 buah dan nilai persen okupansi ikatan hidrogen tertinggi sebesar 44,30% pada jarak 2,835 Å dan sudut ikat 32,05°. Dari perbandingan hasil kedua metode komputasi, rasio optimum yang direkomendasikan untuk sintesis adalah 1:3 (brazilein:asam metakrilat).

Kata kunci: brazilein, pemodelan, polimer tercetak secara molekular, simulasi dinamika molekular, teori fungsi kerapatan.

***MODELING AND SIMULATION TO DESIGN MOLECULARLY
IMPRINTED POLYMER OF BRAZILEIN WITH METHACRYLIC ACID AS
FUNCTIONAL MONOMER***

Faqih Abdurrahman

14/364419/PA/15989

ABSTRACT

Research on design of molecularly imprinted polymer of brazilein using modeling and molecular dynamic simulation has been conducted. This research aim to decide the optimum ratio of brazilein:methacrylic acid and to study the formation of hydrogen bond that occurred during synthesis process.

Study on modeling performed by quantum mechanical calculation of DFT/B3LYP (6-31G(d)) and molecular dynamic simulation using AMBER. This research was begun with structure optimization of brazilein as template, methacrylic acid as functional monomer, ethylene glycol dimethacrylate as cross-linked monomer, and 2,2- azobis(isobutironitrile) as inisiator in chloroform as solvent. Then, modeling of brazilein and methacrylic acid complexes was performed in 1:1, 1:2, 1:3, 1:4, and 1:5 ratios to get the interaction energy of complexes. After that, molecular dynamic simulation was performed on simulation box which has been minimized and equilibrated to gain the data of hydrogen bond during 5 ns simulation.

The result of quantum mechanical calculation of brazilein and methacrylic acid complex showed that the optimum ratio of complex was 1:4 with interaction energy of -47.247 kcal/mol. However, the result of molecular dynamic simulation reveals that effective interaction only occur in three methacrylic acid with four hydrogen bond and the highest occupancy value of 44.30% at distance 2.835 Å and angle bond of 32.05°. In conclusion from the comparison of both results, the recommended ratio for further experimental synthesis was 1:3 (brazilein:methacrylic acid).

Keyword: brazilein, density functional theory, modeling, molecular dynamic simulation, molecularly imprinted polymer.