

**SIMULASI UNTUK RANCANGAN POLIMER TERCETAK MOLEKUL  
(+)-METAMFETAMIN DAN TETRAHIDROKANABINOL**

RAIHAN WIRA DANURDARA  
15/379640/PA/16698

**INTISARI**

Kajian rancangan polimer tercetak molekul (PTM) (+)-metamfetamin dan tetrahidrokanabinol dengan monomer fungsional asam metakrilat dilakukan dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekular (DM) dan metode solvasi *polarizable continuum model* (PCM). Tujuan penelitian ini adalah untuk merancang model polimer tercetak molekul untuk metamfetamin dan tetrahidrokanabinol sebagai templat molekul dengan asam metakrilat sebagai monomer fungsional serta mengetahui nisbah optimum kompleks metamfetamin dengan asam metakrilat dan tetrahidrokanabinol dengan asam metakrilat berdasarkan hasil simulasi dinamika molekular, grafik fungsi radial terdistribusi (FRT), dan analisis okupansi.

Penelitian diawali dengan pembuatan sistem pra-polimerisasi PTM yang berbentuk kubus dengan dimensi sebesar 70 Å yang (+)-metamfetamin maupun tetrahidrokanabinol sebagai templat, asam metakrilat sebagai monomer fungsional, etilen glikol dimetakrilat sebagai monomer taut silang, 2,2'-azobis(2-metilpropionitril) sebagai inisiator, dan kloroform sebagai pelarut. Simulasi DM dilakukan pada kondisi jumlah molekul, tekanan, dan temperatur (NPT) tetap. Nisbah templat dan asam metakrilat diperoleh dari hasil perbandingan pada simulasi DM. Model PTM metamfetamin dapat terbentuk berdasarkan persentase okupansi ikatan hidrogen sebesar 67,35% dengan nisbah optimum 1:2. Sementara model PTM tetrahidrokanabinol juga dapat terbentuk berdasarkan persentase okupansi ikatan hidrogen sebesar 47,97% dengan nisbah optimum 1:1.

Kata kunci: simulasi, polimer tercetak molekul (PTM), model, (+)-metamfetamin, tetrahidrokanabinol.

## **SIMULATION OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMERS MODEL FOR (+)-METHAMPHETAMINE AND TETRAHYDROCANNABINOL**

RAIHAN WIRA DANURDARA  
15/379640/PA/16698

### **ABSTRACT**

The study of molecularly imprinted polymers (MIP) model of (+)-methamphetamine and tetrahydrocannabinol with functional monomer methacrylic acid was conducted using molecular dynamics (MD) simulation and polarizable continuum model (PCM) solvation methods. The goal in this research was to design molecularly imprinted polymers for (+)-methamphetamine and tetrahydrocannabinol as template molecule with methacrylic acid as functional monomer and to find optimum ratio complex (+)-methamphetamine with methacrylic acid and tetrahydrocannabinol with methacrylic acid based on results from molecular dynamics simulation, radial distribution function (RDF) graphs, and occupancy analysis.

First step in this research was to make pre-arrangement MIP with cubic shape in dimension within size 70 Å that included tetrahydrocannabinol and methamphetamine as template, methacrylic acid as functional monomer, ethylene glycol dimethacrylate as crosslinking monomer, 2,2'-azobis(2-methylpropionitrile) as initiator, and chloroform as solvent. MD simulation we're done at constant total particle, pressure, and temperature (NPT). The ratio of template molecule and methacrylic acid was obtained from comparing MD simulation of template-methacrylic acid complex, methacrylic acid, and template. MIP (+)-methamphetamine model was formed based on hydrogen bond occupancy percentage 67,35% with optimum ratio 1:2. While MIP tetrahydrocannabinol was formed either based on hydrogen bond occupancy percentage of 47,97% with optimum ratio 1:1.

**Keywords:** simulation, molecularly imprinted polymers (MIP), model, (+)-methamphetamine, tetrahydrocannabinol.