

PEMODELAN MOLEKUL BERDASARKAN METODE SEMIEMPIRIK PM3 UNTUK RANCANGAN POLIMER TERCETAK MOLEKUL KAFEIN

Fernando
11/317048/PA/14165

INTISARI

Kajian pemodelan molekul berdasarkan metode semiempirik PM3 untuk rancangan polimer tercetak molekul kafein telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan monomer fungsional yang ideal dan rasio kafein-asam itakonat yang optimum untuk meningkatkan selektivitas dan afinitas polimer tercetak molekul kafein.

Penelitian diawali dengan penentuan metode perhitungan berdasarkan data sifat kafein dari beberapa metode perhitungan dibandingkan dengan data eksperimental. Tahap kedua penentuan monomer fungsional yang ideal untuk kafein menggunakan pendekatan metode semiempirik PM3. Proses seleksi didasari oleh parameter momen dipol, energi interaksi, dan ikatan hidrogen yang terbentuk. Tahap ketiga adalah penentuan rasio optimum kafein-asam itakonat yang dikaji melalui pemodelan molekul dengan mempelajari interaksi non kovalen antara kafein sebagai templat dan asam itakonat sebagai monomer fungsional. Evaluasi rasio optimum didasarkan pada kestabilan kompleks antara kafein dan asam itakonat.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa kompleks yang stabil (menunjukkan adanya interaksi melalui ikatan hidrogen. Salah satu monomer yang terpilih untuk berinteraksi dengan kafein adalah asam itakonat. Kompleks dengan interaksi optimum diperoleh dari kompleks dengan varias rasio 1:1. Kompleks dengan rasio ini direkomendasikan sebagai rasio molekul terbaik pada sintesis polimer tercetak kafein.

Kata Kunci : kafein, asam itakonat, semiempirik PM3, polimer tercetak molekul

MOLECULAR MODELING BASED ON PM3 SEMIEMPIRIC METHOD FOR CAFFEINE MOLECULAR IMPRINTED POLYMER DESIGN

Fernando
11/317048/PA/14165

ABSTRACT

Molecular modeling study based on PM3 semiempiric method for caffeine molecular imprinted polymer design has been conducted. The aims of the research are to choose suitable functional monomers and to obtain caffeine-itaconic acid optimum ratio in molecular imprinted polymer (MIP) to increase the selectivity and affinity.

The first step of experiment was determination of calculation method that was based on comparison of caffeine data from several calculation methods and experiment. Second step was selection of the suitable functional monomer for caffeine by using computational chemistry approach applying PM3 semiempirical method. Selection processes have been done based on dipole moment, interaction energy, and hydrogen bonding parameters. Last step experiment was determination of optimum ratio between caffeine/itaconic acid. This study was performed based on molecular modeling to study non covalent interactions between caffeine as template and itaconic acids as functional monomer. The evaluation to determine optimum ratio was done based on stability of caffeine-itaconic acid complex.

The result showed that the stable complex of caffeine and itaconic acid involved hydrogen bonding interactions. One of functional monomers selected that suitable for caffeine was itaconic acid. A complex with optimum interaction was obtained at the ratio of 1:1. This indicates that the best complex of caffeine-itaconic acid for synthesize of caffeine imprinted polymer achieved at 1:1 molecule ratio.

Keywords: caffeine, itaconic acid, PM3 semiempirical, molecular imprinted polymer