

PEMODELAN MOLEKUL DAN SINTESIS POLIMER TERCETAK MOLEKUL NIKOTIN DENGAN MONOMER FUNGSIONAL ASAM METAKRILAT

Arif Stiawan
12/331373/PA/14633

INTISARI

Penelitian tentang pemodelan molekul dan sintesis polimer tercetak molekul (MIP) nikotin dengan monomer fungsional asam metakrilat telah dilakukan. Tujuan penelitian adalah untuk memperoleh rasio mol optimum polimer tercetak molekul nikotin-asam metakrilat dengan bantuan kimia komputasi yang kemudian diuji kesesuaian hasilnya dengan hasil sintesis MIP.

Kajian pemodelan dilakukan dengan menggunakan metode mekanika kuantum semiempirik PM3. Sintesis MIP diawali dengan pencampuran templat nikotin dengan asam metakrilat dalam pelarut asetonitril. Selanjutnya dengan penambahan *crosslinker* etilena glikol dimetakrilat (EGDMA) dan inisiator benzoil peroksida. Polimer akan terbentuk setelah diinisiasi termal pada temperatur 68 °C dan hasil polimer dihaluskan sampai diperoleh ukuran 38-75 µm. Penghilangan templat dengan cara ekstraksi soxhlet menggunakan campuran metanol:asam asetat 1:9 (v/v). Sebagai pembanding disintesis kontrol polimer tanpa templat (*Non-Imprinted Polymer*, NIP) dengan prosedur yang sama tanpa templat nikotin. Selanjutnya dilakukan uji *binding* dan karakterisasi dengan *Fourier Transform Infrared Spectrophotometer* (FTIR), *Scanning Electron Microscope* (SEM), *Brauner-Emmet-Teller* (BET), dan *Thermal Gravimetric/ Differential Thermal Analyzer* (DTA).

Hasil penelitian menunjukkan bahwa hasil perhitungan semiempirik PM3 mengindikasikan bahwa kompleks dengan energi interaksi optimum adalah kompleks nikotin:asam metakrilat dengan rasio 1:2 yang memiliki nilai $\Delta(\Delta E)$ sebesar -4,94 kkal/mol. Kompleks dengan rasio ini kemudian dievaluasi dengan hasil sintesis sebagai rasio mol terbaik pada sintesis polimer tercetak nikotin. Sintesis MIP menunjukkan hasil MIP yang optimum dengan jumlah nikotin terikat (Q) tertinggi pada rasio 1:2 sebesar 4,18 mg/g dengan nilai IF sebesar 8,31.

Kata kunci: nikotin, asam metakrilat, semiempirik PM3, MIP, uji *binding*

MOLECULAR MODELLING AND SYNTHESIS OF MOLECULAR IMPRINTED POLYMER OF NICOTINE USING METHACRYLIC ACID AS FUNCTIONAL MONOMER

Arif Stiawan
12/331373/PA/14633

ABSTRACT

Research on molecular modelling and synthesis of molecular imprinted polymers (MIP) nicotine using methacrylic acid as functional monomers had been carried out. The purpose of this study was to obtain the optimum mole ratio of molecular imprinted polymer nicotine-methacrylic acid with computational chemistry method and then the result was compared with the results of MIP synthesis.

Modelling studies were performed using the semiempirical PM3. Synthesis of MIP was begun with mixing the nicotine with methacrylic acid in acetonitril solvent. Futhermore, the mixture was added with ethylene glycol dimethacrylate (EGDMA) as crosslinker and benzoyl peroxide (BPO) as initiator. After thermal initiation, polymer was formed at 68 °C and polymer was grinded to obtain the size 38-75 μm . The template was removed by soxhlet extraction using a mixture of methanol:acetic acid 1:9 (v/v). Non-Imprinted Polymer (NIP) was synthesised with same procedure as synthesis of MIP without template addition. Adsorbtion capacity of MIP and NIP were determined by binding analysis. MIP and NIP were then characterized by Fourier Transform Infrared Spectrophotometer (FTIR), Scanning Electron Microscope (SEM), Brauner-Emmet-Teller (BET), and Thermal Gravimetric/ Differential Thermal analyzer (DTA).

PM3 semiempirical calculation result indicated that the complex with optimum interaction energy was a complex of nicotine:methacrylic acid in the ratio 1:2 with the $\Delta(\Delta E)$ value of -4,94 kkal/mol. The complex with this ratio was evaluated with synthesis as the mole ratio of the best in printed polymer synthesis nicotine. MIP synthesised in laboratory showed that the optimum amount of bound nicotine (Q) was mole ratio 1:2 ratio (4.18 mg/g) with IF falue of 8.31.

Keywords: nicotine, methacrylic acid, semiempirical PM3, MIP, binding analysis