

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR
UNTUK RANCANGAN POLIMER TERCETAK MOLEKUL
SENYAWA KUERSETIN**

AMRULLAH

13/347361/PA/15202

INTISARI

Kajian interaksi molekul templat dengan monomer fungsional untuk rancangan polimer tercetak molekul (*Molecularly Imprinted Polymer*, MIP) kuersetin telah dilakukan dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekular (DM) dan pemodelan dengan model solvasi PCM (*Polarizable Continuum Model*) menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*). Tujuan penelitian ini untuk mengetahui dinamika interaksi molekul templat dengan monomer fungsional serta perbandingan rasio templat:monomer fungsional. Penelitian diawali dengan pembuatan sistem *pre-assembly* MIP yang berbentuk kotak dengan dimensi sebesar 70 Å meliputi kuersetin sebagai templat, asam metakrilat (AM) sebagai monomer fungsional, etilen glikol dimetakrilat sebagai monomer taut silang, 2,2'-azobis(isobutironitril) sebagai inisiator, dan kloroform sebagai pelarut. Simulasi dilakukan pada kondisi NVT untuk menentukan jumlah ikatan hidrogen pada molekul kuersetin dengan AM berdasarkan grafik RDF (*Radial Distribution Functional*) antara atom/situs aktifnya. Rasio kuersetin dan AM diperoleh dari hasil perbandingan pada simulasi DM dan hasil pemodelan PCM. Interaksi antara kuersetin dengan asam metakrilat pada saat simulasi tidak selalu dapat terjadi yang disebabkan oleh keberadaan molekul monomer taut silang. Untuk menghasilkan MIP yang relatif stabil pada MIP kuersetin diperoleh rasio 1:3 (kuersetin:AM).

Kata kunci: Polimer tercetak molekul, simulasi dinamika molekular, teori fungsi kerapatan, *polarizable continuum model*, kuersetin.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION TO DESIGN OF QUERCETIN MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER

AMRULLAH

13/347361/PA/15202

ABSTRACT

Interaction study of template with functional monomer for design Molecularly Imprinted Polymer (MIP) for quercetin has been done using Molecular Dynamics (MD) simulation and Density Functional Theory (DFT) methods with solvation effect PCM (*Polarizable Continuum Model*). The aims of the research were to know interaction of template with functional monomer and to obtain optimum ratio of complex (template:functional monomer). Simulation box was built for imitate a system pre-assembly of MIP with length 70 Å, contained several components like quercetin as template, methacrylic acid (MAA) as functional monomer, ethylene glycol dimethacrylate as crosslinker monomer, 2,2'-azobis(isobutyronitrile) as initiator, and chloroform as solvent, and then sampling data was performed under condition NVT ensemble. Number and presence of hydrogen bonds will be determined on simulation using Radial Distribution Functional (RDF) of atoms/active site template and functional monomer. Optimum ratio between quercetin and MAA was defined by comparison result from PCM and molecular dynamic simulation. During simulation time, it was found that not all of the quercetin will make interaction with MAA due to crosslinker has probabilities to block their interaction whereas optimum ratio of MIP quercetin:MAA is 1:3.

Keywords: Molecularly imprinted polymer, dynamic molecular simulation, density functional theory, polarizable continuum model, quercetin.