

RANCANGAN BERBASIS KOMPUTER UNTUK POLIMER TERCETAK MOLEKUL AUKSIN BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL

Pratiwidianti Vanjani
13/347240/PA/15178

INTISARI

Telah dilakukan rancangan berbasis komputer untuk polimer tercetak molekul (*Molecularly Imprinted Polymer*, MIP) auksin. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui rasio optimum antara templat dengan monomer fungsionalnya dan menjelaskan fenomena ikatan hidrogen yang terjadi pada sistem pra kompleksasi selama waktu simulasi.

Perhitungan mekanika kuantum dilakukan dengan mengkalkulasikan energi interaksi auksin sebagai templat dengan asam metakrilat (MAA) sebagai monomer fungsionalnya menggunakan teori fungsi kerapatan (*Density Functional Theory*, DFT). Pada simulasi dinamika molekul (DM) dimasukkan molekul auksin, MAA, etilen glikol dimetakrilat (EGDMA) sebagai monomer *crosslinker*, azobisisobutironitril (AIBN) sebagai inisiator, dan kloroform sebagai pelarut dalam boks simulasi kubik panjang 70 Å. Ensemble yang digunakan adalah NVT dengan lama simulasi 5 ns.

Hasil penelitian menunjukkan adanya ikatan hidrogen antara templat auksin dengan MAA. Berdasarkan analisis energi interaksi dan ikatan hidrogen tersebut maka didapatkan rasio optimum templat:MAA yakni 1:1.

Kata kunci: dinamika molekul, polimer tercetak molekul, auksin, teori fungsi kerapatan

COMPUTER AIDED DESIGN OF MOLECULARLY IMPRINTED POLYMER OF AUXIN BASED ON MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Pratiwidianti Vanjani

13/347240/PA/15178

ABSTRACT

Computer aided design of molecularly imprinted polymer of auxin based on molecular dynamic simulation has been conducted. The aims of this research are to determine the optimum ratio between template and its monomer functionals and to explain the hydrogen bonding phenomenon that occurred during simulation of the pre complexation system.

Quantum mechanics study was conducted by calculating the interaction energy of auxin as template and methacrylic acids (MAA) as functional monomers using Density Functional Theory (DFT) method. Molecular dynamic (MD) simulation was done by inserting auxins, MAAs, ethylene glycol dimethacrylates (EGDMAs) as crosslinker, azobisisobutyronitriles (AIBNs) as initiator, and chloroforms as solvent in a simulation box with length 70 Å. Ensemble that we used was NVT with simulation duration was 5 ns.

The result showed the presence of hydrogen bonds between auxin template and MAA. Based on the analysis of interaction energy and hydrogen bonds, we get the optimal ratio of the template:MAA was 1:1.

Keywords: molecular dynamic, molecularly imprinted polymer, auxin, density functional theory