

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II. 1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Polimer tercetak molekul	5
II.1.2 MIP sebagai pengemban bahan kimia	6
II.2.3 Mekanika kuantum pada rancangan MIP	7
II.2.4 Simulasi dinamika molekuler pada rancangan MIP	10
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	13
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	13
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	13
II.2.3 Rancangan penelitian	14
BAB III METODE PENELITIAN	15
III.1 Alat dan Materi Penelitian	15
III.1.1. Materi penelitian	15
III.1.2 Alat	15
III.2 Prosedur Kerja	15
III.2.1 Studi mekanika kuantum pra kompleksasi MIP auksin	15
III.2.2 Simulasi dinamika molekuler pra kompleksasi MIP auksin	16
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	18
IV.1 Studi mekanika kuantum rancangan MIP auksin	18
IV.2 Simulasi dinamika molekul pra kompleksasi MIP auksin	22
IV.2.1 Preparasi dan simulasi	23
IV.2.2 Analisis ikatan hidrogen dan fenomena yang terjadi pada simulasi pra kompleksasi MIP auksin	25
IV.2.3 Analisis <i>radial distribution function</i>	32
IV.3 Analisis rasio optimum MIP auksin	34
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	36
V.1 Kesimpulan	36
V.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	41

DAFTAR TABEL

Tabel IV.1	Data energi ikat auksin dengan monomer fungsional MAA pada variasi rasio molekul	20
Tabel IV.2	Ikatan hidrogen dengan keterjadian tertinggi pada <i>cut off</i> jarak 3 Å dan sudut 60° simulasi pra kompleksasi MIP auksin	29
Tabel IV.3	Nilai karakteristik dari fungsi distribusi radial yang diperoleh dari simulasi dinamika molekul MIP auksin	33

DAFTAR GAMBAR

Gambar I.1	Struktur 2D molekul auksin (asam indol-3-asetat)	3
Gambar II.1	Skema pembentukan polimer tercetak molekul (a) <i>self assembly</i> , (b) polimerisasi, (c) penghilangan atau pengikatan kembali templat (Li dkk., 2016)	6
Gambar IV.1	Struktur optimum 3D molekul auksin beserta analisis populasi Mulliken	19
Gambar IV.2	Grafik ΔE dan $\Delta(\Delta E)$ untuk kompleks auksin dan MAA	21
Gambar IV.3	Visualisasi interaksi yang terjadi dengan rasio auksin:MAA (a) 1:1, (b) 1:2, dan (c) 1:3.	22
Gambar IV.4	Grafik minimisasi pra kompleksasi MIP auksin	24
Gambar IV.5	Profil kenaikan suhu hingga ekuilibrasi pada simulasi pra kompleksasi MIP auksin	24
Gambar IV.6	Ekuilibrasi tekanan pada simulasi pra kompleksasi MIP auksin	25
Gambar IV.7	Grafik total ikatan hidrogen yang terjadi pada molekul auksin dan MAA selama simulasi MIP auksin	26
Gambar IV.8	Grafik ikatan hidrogen yang terjadi pada auksin residu nomor (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, dan (g) 7	27
Gambar IV.9	Struktur 3D molekul EGDMA	29
Gambar IV.10	Ikatan hidrogen yang terjadi pada saat simulasi (a) auksin-MAA (b) MAA-MAA	30
Gambar IV.11	Perubahan interaksi pada templat-monomer fungsional terpilih selama waktu simulasi (a) 0, (b) 1 (c) 2, (d) 3, (e) 4, (f) 5 ns	31
Gambar IV.12	Visualisasi akhir simulasi dinamika molekul pra kompleksasi MIP auksin beserta kaviti yang terbentuk auksin residu (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, dan (g) 7	32
Gambar IV.13	RDF hasil simulasi dinamika molekul pra kompleksasi MIP auksin untuk (a) O1-H6, (b) H9-O1, dan (c) H1-O1	34
Gambar IV.14	Skema hipotesis polimerisasi MIP auksin dengan rasio 1:1	35

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Struktur senyawa yang digunakan pada penelitian.	41
Lampiran 2 Output trayektori keterjadian ikatan hidrogen	42