

INTISARI

PEMODELAN MOLEKUL BERDASARKAN METODA PERHITUNGAN SEMIEMPIRIK AM1 UNTUK SINTESIS POLIMER TERCETAK MOLEKUL ASAM KAFEAT

Oleh:

Arma Desta Wiratama
11/320022/PA/14318

Telah dilakukan pemodelan molekul pada sintesis polimer tercetak molekul (*Molecular Imprinted Polymer*, MIP) berdasarkan metode semiempirik AM1. Tujuan penelitian ini adalah memilih monomer fungsional yang sesuai serta memperoleh rasio molekul dalam MIP yang dapat meningkatkan selektivitas dan afinitas.

Pada tahap pertama, penelitian berupa pemilihan monomer fungsional yang efektif untuk asam kafeat dan dilakukan dengan pendekatan kimia komputasi menggunakan metode semiempirik AM1. Proses seleksi didasarkan pada parameter momen dipol, energi interaksi, dan ikatan hidrogen yang terbentuk. Tahap kedua adalah penentuan rasio optimum asam kafeat/asam metakrilat. Kajian dilakukan dengan pemodelan molekul yang mempelajari interaksi non kovalen antara asam kafeat sebagai templat dan asam metakrilat sebagai monomer fungsional. Evaluasi rasio optimum didasarkan pada kestabilan kompleks antara asam kafeat dan asam metakrilat.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa kompleks stabil terbentuk dengan melibatkan ikatan hidrogen. Dari hasil kajian terpilih beberapa monomer fungsional yang sesuai untuk asam kafeat seperti asam metakrilat dan asam akrilat. Kompleks dengan energi interaksi optimum diperoleh dari kompleks asam kafeat/asam metakrilat dengan rasio 1:1. Kompleks dengan rasio ini kemudian direkomendasikan sebagai rasio molekul terbaik pada sintesis polimer tercetak asam kafeat. Pada pencarian templat pengganti sebagai pengganti asam kafeat terpilih senyawa asam 3-(4-metoksifenil)-propanoat berdasarkan pada kesesuaian nilai momen dipol, BM dan volume molekular.

Kata kunci : asam kafeat, asam metakrilat, semiempirik AM1, polimer tercetak molekul

ABSTRACT

MOLECULAR MODELLING BASED ON AM1 SEMIEMPIRICAL METHOD FOR SYNTHESIS OF CAFFEIC ACID MOLECULAR IMPRINTED POLYMER

By:

Arma Desta Wiratama

11/320022/PA/14318

Research on molecular modelling based on AM1 semiempirical method for synthesis of molecularly imprinted polymer has been conducted. The aims of the research are to choose suitable functional monomers and to obtain molecule ratio in MIP to increase the selectivity and affinity.

The first stage of experiment was selection of the effective functional monomer for MIP synthesis of caffeic acid and it, was done by using computational chemistry approach applying AM1 semiempirical method. Selection processes have been done based on dipole moment, interaction energy, and hydrogen bonding parameters. Second stage experiment was determination of optimum ratio between caffeic acid/methacrylic acid for designing of molecular imprinted polymer (MIP). This study was performed based on molecular modeling to study non covalent interactions between caffeic acid as template and methacrylic acids as functional monomers. The evaluation to determine stability of a caffeic acid/methacrylic acid complex was done based on interaction energies obtained from calculation.

The result showed that the stable complex of caffeic acid and methacrylic acid involves hydrogen bonding interactions. From the result study selected some functional monomers that suitable for caffeic acid such as methacrylic and acrylic acids. A complex with optimum interaction energy was obtained at the ratio of caffeic/methacrylic of 1:1. This indicates that the best molecule ratio of caffeic acid/methacrylic acid for synthesise of caffeic acid imprinted polymer achieved at 1:1 molecule ratio. Based on value suitability of dipole moment, molecular weight and molecular volume, 3-(4-methoxyphenyl)-propanoic acid has been selected as caffeic acid substitute template.

Keywords: caffeic acid, methacrylic acid, AM1 semiempirical, molecular imprinted polymer