

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

SYLVIA AGNES MONICA
12/339347/PA/15108

INTISARI

Telah dilakukan penelitian pemodelan molekul dan sintesis polimer tercetak molekul kolesterol atau *Molecular Imprinted Polymers* (MIP) dengan monomer fungsional asam metakrilat. Tujuan penelitian ini adalah melakukan pemodelan molekul untuk MIP kolesterol dengan berbantuan komputer sehingga diperoleh rasio molekul templat/monomer fungsional yang optimum. Pemodelan molekul dilakukan dengan metode semiempirik *Austin Model 1* (AM1). Sintesis MIP dilakukan dengan polimerisasi *bulk* antara kolesterol, asam metakrilat, etilen glikol dimetakrilat, dan 2,2'-azobis(2-metilpropionitril) dalam pelarut tetrahidrofuran melalui *waterbath* pada temperatur 68-70 °C. Pencucian polimer dilakukan dengan ekstraksi Soxhlet menggunakan pelarut 10% (v:v) asam asetat:metanol. *Non Imprinted Polymers* (NIP) dibuat sebagai polimer pembanding. Polimer dikarakterisasi dengan *Fourier Transform Infrared* (FTIR), *Scanning Electron Microscope* (SEM), *Thermal Gravimetric* (TG), dan *Differential Thermal Analysis* (DTA). Uji *binding* dilakukan untuk menentukan kapasitas pengikatan kolesterol oleh polimer.

Dari hasil pemodelan dengan metoda AM1 berdasarkan perhitungan energi interaksi kompleks kolesterol-asam metakrilat ditentukan rasio 1:1 sebagai rasio optimum dengan nilai $\Delta E = 3,99$ kkal/mol. Sintesis MIP dengan NIP sebagai kontrol menghasilkan polimer berpori bebas dari molekul kolesterol. Kapasitas pengikatan (Q) tertinggi ditemukan pada MIP rasio 1:1 sebesar 60,87 mg/g dengan nilai faktor pencetakan (IF) sebesar 44,94.

Kata kunci : pemodelan, MIP, kolesterol, rasio molekul, semiempirik

***MOLECULAR MODELLING AND SYNTHESIS OF
CHOLESTEROL MOLECULAR IMPRINTED POLYMERS
USING METHACRYLIC ACID AS FUNCTIONAL MONOMER***

SYLVIA AGNES MONICA

12/339347/PA/15108

ABSTRACT

Research on molecular modelling and synthesis of cholesterol molecular imprinted polymers (MIP) using methacrylic acid as functional monomer has been carried out. The purpose of the research is to carry out the cholesterol MIP molecular modelling via computer aided design method to obtain optimum template/functional monomer ratio. Molecular modelling was done by using Austin Model 1 (AM1) semiempirical method. Synthesis of MIP was done by bulk polymerization using cholesterol, methacrylic acid, ethylene glycol dimethacrylate, and 2,2'-azobis(2-methylpropionitrile) in tetrahydrofuran solvent through waterbath at 68-70 °C. Polymer leaching was done by Soxhlet extraction using 10% (v:v) acetic acid:methanol. Non Imprinted Polymers (NIP) were made as a control polymer. Characterization of polymers was done by *Fourier Transform Infrared* (FTIR), *Scanning Electron Microscope* (SEM), *Thermal Gravimetric* (TG), and *Differential Thermal Analysis* (DTA). Binding quality value was determined by binding analysis.

Based on the molecular modelling result, 1:1 was determined as the most optimum template/functional monomer ratio with $\Delta E = 3.988$ kkal/mol. Synthesis of MIP using NIP as control produce porous polymers which is free from cholesterol. The highest binding quality value was found at MIP 1:1 by 60.87 mg/g with IF value by 44.94.

Keywords : modelling, MIP, cholesterol, mole ratio, semiempirical