

PEMODELAN MOLEKUL DAN SINTESIS POLIMER TERCETAK MOLEKUL KAFEIN DENGAN MONOMER FUNGSIONAL METIL EUGENOL

Agata Rosa Vera
12/330917/PA/14404

INTISARI

Penelitian tentang pemodelan molekul dan sintesis polimer tercetak molekul kafein dengan monomer fungsional metil eugenol telah dilakukan. Tujuan penelitian adalah untuk memperoleh rasio mol optimum polimer tercetak molekul (MIP) kafein dengan metil eugenol dan desain hasil dengan bantuan kimia komputasi. Kajian pemodelan dilakukan dengan menggunakan metode semiempirik AM1. Sintesis MIP diawali dengan pencampuran templat kafein dengan metil eugenol dalam pelarut asetonitril. Selanjutnya dengan penambahan crosslinker etilena glikol dimetakrilat dan inisiator 2,2'-azobis-(2-metilpropionitril). Polimer terbentuk setelah diinisiasi termal pada temperature 68-70 °C dan hasil polimer dihaluskan sampai diperoleh ukuran 38-75 µm. Penghilangan templat dengan cara ekstraksi soxhlet menggunakan campuran metanol:asam asetat 1:9 (v/v). Sebagai pembanding disintesis NIP dengan prosedur yang sama tanpa templat. Selanjutnya dilakukan uji *binding* dan karakterisasi dengan spektrofotometer inframerah (FTIR), *scanning electron microscope* (SEM), *thermal gravimetric analysis* (TGA) dan *differential thermal analysis* (DTA).

Hasil penelitian menunjukkan bahwa hasil perhitungan semiempirik AM1 mengindikasikan bahwa kompleks dengan energi interaksi optimum adalah kompleks kafein:metil eugenol dengan rasio 1:1. Kompleks dengan rasio ini kemudian dievaluasi dengan hasil sintesis sebagai rasio mol terbaik pada sintesis polimer tercetak kafein. Sintesis MIP menunjukkan hasil MIP yang optimum dengan jumlah kafein yang terikat (Q) tertinggi pada rasio 1:1 sebesar 259,31 µg/g dengan nilai IF sebesar 25,80.

Kata kunci: kafein, metil eugenol, semiempirik AM1, polimer tercetak molekul, uji *binding*

MOLECULAR MODELLING AND SYNTHESIS OF MOLECULAR IMPRINTED POLYMER OF CAFFEINE USING METHYL EUGENOL AS FUNCTIONAL MONOMER

Agata Rosa Vera
12/330917/PA/14404

ABSTRACT

Research on molecular modelling and synthesis of molecular imprinted polymers caffeine using methyl eugenol as functional monomers has been done. The research objective was to obtain the optimum mole ratio of molecular imprinted polymers (MIP) caffeine with methyl eugenol and the result design with computational chemistry. Modelling studies performed using the semiempirical AM1. MIP synthesis template was begun with mixing the caffeine with methyl eugenol in acetonitrile solvent. Furthermore, with the addition of ethylene glycol dimethacrylate crosslinker and 2,2'-azobis-(2-methylpropionitrile) initiator. Polymer was formed after thermal initiation at the temperature of 68-70 °C and polymer was grinded to obtain the size of 38-75 µm. The elimination of the template by Soxhlet extraction used a mixture of methanol: acetic acid 1:9 (v/v). Synthesis NIP was compared by the same procedure without template. Furthermore, binding analysis and characterization with an infrared spectrophotometer (FTIR), scanning electron microscope (SEM), thermal gravimetric analysis (TGA) and differential thermal analysis (DTA).

The results showed that the AM1 semiempirical calculation results indicate that the complex with optimum interaction energy is a complex of caffeine: methyl eugenol in the ratio 1:1. The complex with this ratio was evaluated with synthesis as the mole ratio of the best in printed polymer synthesis caffeine. The results of MIP synthesis showed that the optimum amount of bound caffeine (Q) on a 1:1 ratio of 259.31 µg/g with IF value of 25.80.

Keywords: caffeine, methyl eugenol, semiempirical AM1, molecular imprinted polymers, binding analysis.