

## PEMODELAN MOLEKUL DAN SINTESIS POLIMER TERCETAK MOLEKUL KOLESTEROL DENGAN MONOMER FUNGSIONAL ASAM ITAKONAT

Oleh:

Gianina Amanda Puteri

12/334828/PA/15027

### INTISARI

Penelitian tentang pemodelan molekul dan sintesis polimer tercetak molekul atau *Molecular Imprinted Polymer* (MIP) kolesterol dengan monomer fungsional asam itakonat telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk memperoleh rasio mol optimum kolesterol-asam itakonat dengan bantuan kimia komputasi yang kemudian diuji kesesuaian hasilnya dengan hasil sintesis MIP.

Kajian pemodelan dilakukan dengan menggunakan metode mekanika kuantum semiempirik AM1. Sintesis MIP diawali dengan pencampuran templat kolesterol dengan asam itakonat dalam pelarut tetrahidrofur (THF), selanjutnya ditambahkan dengan *cross-linker* etilena glikol dimetakrilat (EGDMA) dan inisiator 2,2'-azobis-2-metilpropionitril. Polimer akan terbentuk setelah diinisiasi termal pada temperatur  $\pm 60$  °C dan hasil polimer digerus hingga diperoleh ukuran 38-75  $\mu\text{m}$ . Penghilangan templat dilakukan dengan cara ekstraksi soxhlet menggunakan campuran pelarut metanol dan asam asetat dengan perbandingan sebesar 1:9 (v/v). Sebagai pembandingnya, disintesis *Non Imprinted Polymer* (NIP) dengan prosedur yang sama tanpa menggunakan templat kolesterol. Selanjutnya dilakukan uji *binding* dan karakterisasi dengan *Fourier Transform Infrared Spectrophotometer* (FTIR), *Scanning Electron Microscope* (SEM), *Thermal Gravimetric/Differential Thermal Analyzer* (TG/DTA), dan *Brauner-Emmet-Teller Adsorption Analyzer* (BET).

Hasil perhitungan semiempirik AM1 menunjukkan bahwa kompleks dengan energi interaksi optimum adalah kompleks kolesterol:asam itakonat dengan rasio 1:1 yang memiliki nilai  $\Delta(\Delta E)$  sebesar -5,52 kkal/mol. Kompleks dengan rasio ini kemudian dievaluasi dengan hasil sintesis sebagai rasio mol terbaik pada sintesis polimer tercetak molekul kolesterol. Sintesis MIP menunjukkan hasil MIP yang optimum dengan jumlah kolesterol yang terikat (Q) tertinggi pada rasio 1:1 sebesar 14,82 mg/g dan nilai IF sebesar 6,27.

Kata kunci : kolesterol, asam itakonat, semiempirik AM1, polimer tercetak molekul, uji *binding*.

## MOLECULAR MODELING AND SYNTHESIS OF MOLECULAR IMPRINTED POLYMER OF CHOLESTEROL WITH ITACONIC ACID AS A FUNCTIONAL MONOMER

By:

Gianina Amanda Puteri

12/334828/PA/15027

### ABSTRACT

Research on molecular modeling and synthesis of Molecular Imprinted Polymer (MIP) of cholesterol with itaconic acid as a functional monomer has been performed. The purpose of this study was to obtain the optimum mole ratio of cholesterol-itaconic acid by using computational chemistry method followed with testing the suitability of the results with the results of MIP synthesis.

The modeling studies were performed using AM1 semi-empirical quantum mechanics method. Synthesis of MIP was initiated by mixing the cholesterol template with itaconic acid in the tetrahydrofuran (THF), then added with a cross-linker ethylene glycol dimethacrylate (EGDMA) and initiator 2,2'-azobis-2-methylpropionitril. Polymers were formed after being initiated thermally at a temperature of  $\pm 60$  °C. The formed polymers were crushed to obtain the polymer size of 38-75  $\mu\text{m}$ . The removal of the template was done by soxhlet extraction using a mixture of methanol and acetic acid in the ratio of 1:9 (v/v). As a comparison, Non Imprinted Polymer (NIP) was synthesized by the same procedure without cholesterol as a template. Furthermore, the binding test and characterization were performed by Fourier Transform Infrared Spectrophotometer (FTIR), Scanning Electron Microscope (SEM), Thermal Gravimetric/Differential Thermal Analyzer (TG/DTA), and Brauner-Emmet-Teller Adsorption Analyzer (BET).

The results of AM1 semi-empirical calculation showed that the complex with optimum interaction energy is a complex of cholesterol:itaconic acid with a ratio of 1:1 with the  $\Delta(\Delta E)$  value of -5,52 kcal/mol. The complex of this ratio then evaluated by synthesis as the best mole ratio of printed polymer synthesis of cholesterol molecules. The results of synthesis MIP showed that the optimum amount of bound cholesterol (Q) on a 1:1 ratio of 14,82 mg/g and IF value of 6,27.

Keywords : cholesterol, itaconic acid, semiempirical AM1, molecular imprinted polymer, binding test.