

VOLUME 9

ISSUE 1

JANUARY – JUNE 2021

# Al-Kimia

Potensi Kayu Apu (*Pistia stratiotes*) di Perairan Danau Tempe Kabupaten Wajo, Sulawesi Selatan sebagai Agen Fitoremediasi terhadap Ion Logam Cu<sup>2+</sup>

**Muhammad Nasir, Dingse Pandiangan, Susan Marlein Mambu, Muhummad Nur, Siti Fauziah, Nur Insani Amir, Rizal Irfandi, Sahriah Rahim**

Pembuatan Nano Partikel Kalsium (Ca) dari Limbah Tulang Ikan Patin (*Pangasius sp*) Menggunakan Metode Ultrasound- Assisted Solvent Extraction

**Nuramanyah Taufiq, Risky Nurul Fadlila RN**

Uji Kualitas Tepung Jagung Alternatif dari Limbah Tongkol Jagung dengan menggunakan *Lactobacillus casei*

**Mirawati Mirawati, Ida Irdaliah**

Pemilihan Monomer Fungsional Terbaik Dalam Molecularly Imprinted Polymer (MIP) Monoglisericida Lard Menggunakan Metode Komputasi

**Adi Syahputra, Nurhadini Nurhadini, Fajar Indah Puspitasari**

Pemanfaatan Berbagai Kulit Buah Sebagai Material Penyerap Ion Logam Zinc Pada Limbah Perairan

**Andreas Difa, Desy Kurniawati, Budhi Oktavia, Rahardian Z**

Steroid dari Kulit Batang *Aglaiia grandis* (Meliaceae)

**Siti Hani Pratiwi, Kindi Farabi, Nurlelasari, Rani Maharani, Agus Safari, Unang Supratman, Desi Harneti**

Optimalisasi Penentuan Logam Cu(II) dalam Sampel Air Menggunakan Metoda Voltammetri Stripping Adsorptif (VSA<sub>d</sub>)

**Hilfi Pardi, Nancy Willian**

Kajian in Silico Aktivitas Antioksidan Senyawa Bioaktif dalam Minyak Serai (*Cymbopogon citratus*)

**Dewi Ratih Tirto Sari, Yohanes Bare**

Study in Silico Senyawa Asam Asiatik dan Turunannya Sebagai Anti Katarak

**Firlia Nur Fadila, I Gusti Made Sanjaya**

Sintesis Ferri Salen-Taeniolit Sebagai Katalisator Pada Reaksi Pembentukan Monomer Poli Karbonat

**Alimuddin, Agusriyadin, Syahrir, Laode Abdul Kadir**

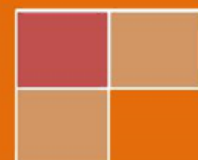
Artikel Review: Faktor yang Mempengaruhi Persen Biogasoline Minyak Nabati Menggunakan Katalis HZSM-5 dengan Metode Catalytic Cracking

**Dewinta Intan Laily, Dina Kartika Maharani**

**Jurusan Kimia UIN Alauddin Makassar**

p-ISSN: 2302-2736

e-ISSN: 2549-9335



# Al-Kimia

**EDITOR IN CHIEF**  
Sjamsiah

**MANAGING EDITOR**  
Ummi Zahra

**REVIEWER**

Suminar Setiati  
Irmanida Batubara  
Sri Sugiarti  
Muharram  
Philiphi De Rosari  
Ajuk Sapar  
Masriany  
Asri Saleh  
Sitti Chadijah  
Asriyani Ilyas  
Aisyah

**SECTION EDITOR**

Rani Maharani  
Iin Novianty  
Firnanely  
Chusnul Khatimah  
Satriani

**PUBLISHER**

Departmen of Chemistry  
Faculty of Science and Technology  
Universitas Islam Negeri Alauddin Makassar  
Jl. H. M. Yasin Limpo No. 36 Gowa South Sulawesi Indonesia  
E -mail: al-kimia@uin-alauddin.ac.id

# Al-Kimia

## TABLE OF CONTENT

Potensi Kayu Apu ( <i>Pistia stratiotes</i> ) di Perairan Danau Tempe Kabupaten Wajo, Sulawesi Selatan sebagai Agen Fitoremediasi terhadap Ion Logam Cu <sup>2+</sup> <b>Muhammad Nasir, Dingse Pandiangan, Susan Marlein Mambu, Muhummad Nur, Siti Fauziah, Nur Insani Amir, Rizal Irfandi, Sahriah Rahim</b>	1-8
Pembuatan Nano Partikel Kalsium (Ca) dari Limbah Tulang Ikan Patin ( <i>Pangasius sp</i> ) Menggunakan Metode Ultrasound- Assisted Solvent Extraction <b>Nuramaniah Taufiq, Risky Nurul Fadlila RN</b>	9-15
Uji Kualitas Tepung Jagung Alternatif dari Limbah Tongkol Jagung menggunakan <i>Lactobacillus casei</i> <b>Mirawati Mirawati, Ida Ildaliah</b>	16-22
Pemilihan Monomer Fungsional Terbaik dalam Molecularly Imprinted Polymer (MIP) Monogliserida Lard Menggunakan Metode Komputasi <b>Adi Syahputra, Nurhadini Nurhadini, Fajar Indah Puspitasari</b>	23-33
Pemanfaatan Berbagai Kulit Buah Sebagai Material Penyerap Ion Logam Zinc Pada Limbah Perairan <b>Andreas Difa, Desy Kurniawati, Budhi Oktavia, Rahardian Z</b>	34-43
Steroid dari Kulit Batang <i>Aglaia grandis</i> (Meliaceae) <b>Siti Hani Pratiwi, Kindi Farabi, Nurilelasari, Rani Maharani, Agus Safari, Unang Supratman, Desi Harneti</b>	44-49
Optimalisasi Penentuan Logam Cu(II) dalam Sampel Air Menggunakan Metoda Voltametri Stripping Adsorptif (VSA <sub>d</sub> ) <b>Hilfi Pardi, Nancy Willian</b>	50-60
Kajian in Silico Aktivitas Antioksidan Senyawa Bioaktif dalam Minyak Serai ( <i>Cymbopogon citratus</i> ) <b>Dewi Ratih Tirto Sari, Yohanes Bare</b>	61-69
Study In Silico Senyawa Asam Asiatik dan Turunannya Sebagai Anti Katarak <b>Firlia Nur Fadila, I Gusti Made Sanjaya</b>	70-80
Sintesis Ferri Salen-Taeniolit Sebagai Katalisator Pada Reaksi Pembentukan Monomer Poli Karbonat <b>Alimuddin, Agusriyadin, Syahrir, Laode Abdul Kadir</b>	81-88
Artikel Review: Faktor yang Mempengaruhi Persen Biogasoline Minyak Nabati Menggunakan Katalis HZSM-5 dengan Metode Catalytic Cracking <b>Dewinta Intan Laily, Dina Kartika Maharani</b>	89-102

## Pemilihan Monomer Fungsional Terbaik Dalam Molecularly Imprinted Polymer (MIP) Monogliserida Lard Menggunakan Metode Komputasi

Adisyahputra\*, Nurhadini, Fajar Indah Puspitasari

Program Studi Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Bangka Belitung,  
Kampus Terpadu Universitas Bangka Belitung, Bangka, Bangka Belitung, 33172

\*Corresponding Author: [putra\\_4d88@yahoo.com](mailto:putra_4d88@yahoo.com)

Received: January,20,2020 /Accepted: June,21,2021  
doi: 10.24252/al-kimiav9i1.10893

**Abstract:** Pembuatan MIP dapat dilakukan dengan bantuan komputer (computer aided) untuk mengurangi trial and error. Dimana molekul target (template) dan monomer fungsional dimodelkan dalam bentuk 3D menggunakan software ChemBio Ultra 12 selanjutnya diinteraksikan menggunakan software AutoDock Tools 1.5.6 dan Pyrx untuk melihat binding interaction yang terjadi dan binding energy serta kemiripan sifat polaritas yang secara teoritis dapat memberikan informasi sebelum dilakukan sintesis MIP. Seleksi monomer fungsional secara bertahap dilakukan berdasarkan ada tidaknya binding interaction, tahap berikutnya dilihat berdasarkan binding energy yang paling besar (negatif) dan terakhir adalah momen dipol. Berdasarkan data tersebut monomer fungsional terpilih adalah molekul Benzo-15-crown-5-acrylamide dengan binding Interaction berupa ikatan hydrogen serta nilai binding energy dan momen dipol paling besar.

*Key word:* monomer fungsional, MIP, binding energy, binding interaction, momen dipol

### PENDAHULUAN

Kehalalan suatu produk pangan sangatlah penting di Indonesia dikarenakan mayoritas masyarakatnya adalah muslim. Kehalalan suatu produk pangan salah satunya ditentukan oleh ada tidaknya kandungan minyak/lemak babi di dalamnya. Indonesia telah memiliki lembaga khusus yang mempunyai legalitas untuk memberikan sertifikat kehalalan suatu produk pangan yaitu LPPOM MUI. LPPOM MUI mempunyai paling tidak sebelas parameter dalam sistem jaminan halalannya untuk memastikan kehalalan suatu produk. Tidak jarang kita mendengar laporan bahwa banyak produk pangan yang beredar di pasaran masih mengandung minyak/lemak babi serta adanya produk pangan memiliki logo halal MUI yang berbeda dan bahkan tidak jarang juga kita tidak melihat logo halal pada suatu produk pangan.

Kandungan minyak/lemak babi dalam suatu produk pangan memerlukan proses pengujian yang cukup panjang dan mahal karena harus dilakukan pengujian di laboratorium seperti menggunakan kromatografi (Heliawati, 2004) dan FT-IR (Rahayu, *et.al*, 2018). Selain itu, sampel pangan yang digunakan haruslah representatif dan tidak boleh ditentukan oleh produsennya. Oleh sebab itu diperlukan metode atau teknik analisis yang dapat secara akurat, cepat dan murah serta mudah untuk digunakan. Salah satu metode atau teknik analisis yang dapat digunakan adalah pemanfaatan *Molecularly Imprinted Polymer* (MIP) yang dapat mengenali secara spesifik senyawa target yang ingin diketahui.

MIP merupakan polimer yang mempunyai rongga atau pori akibat pembuangan *template* melalui proses ekstraksi setelah terbentuknya polimer, dimana rongga (cavities) tersebut nantinya dapat berfungsi untuk mengenali molekul target dengan ukuran/bentuk, struktur dan sifat yang sama dengan templatennya. Dalam proses polimerisasi MIP melibatkan monomer fungsional, *crosslinker*, inisiator dan pelarut. Pemilihan monomer

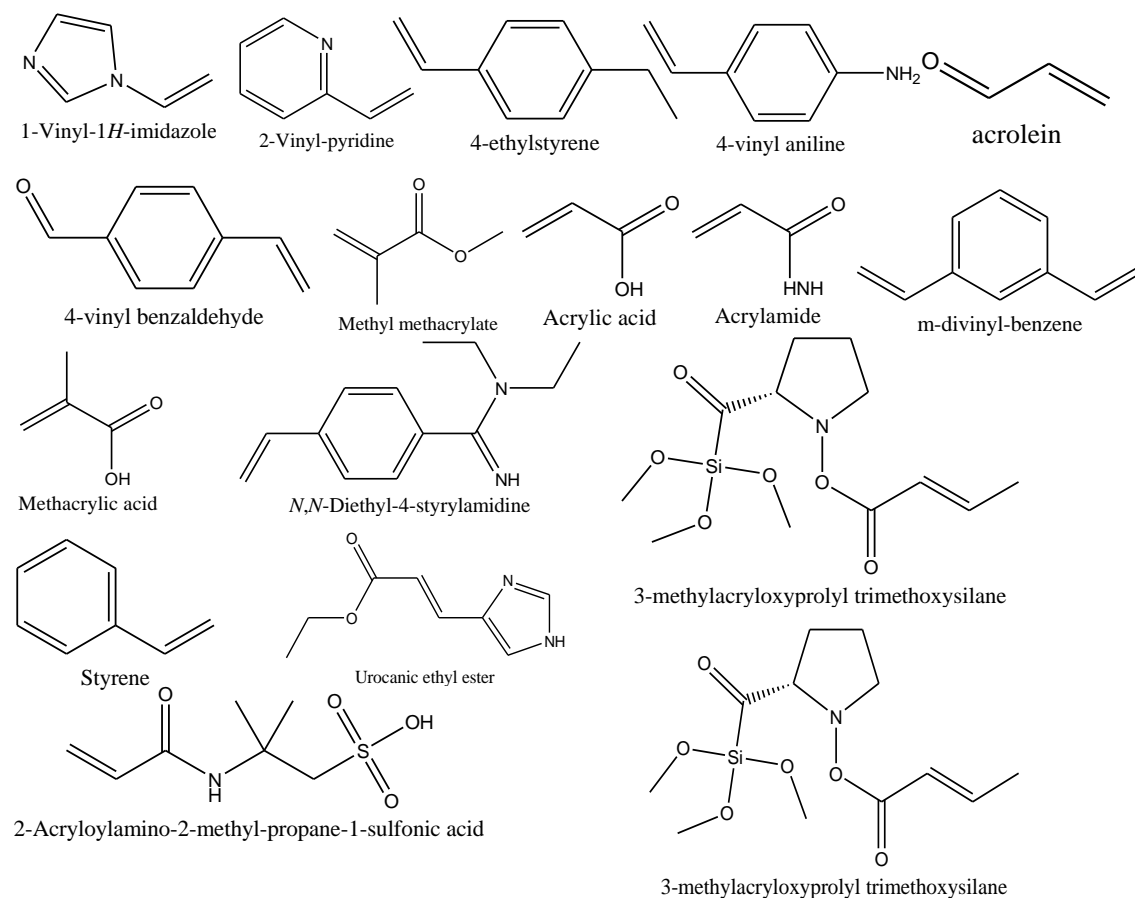
yang tepat akan menentukan produk MIP yang baik. Kestabilan polimer yang terbentuk ditentukan oleh interaksi non kovalen antara monomer fungsional dan template, serta *crosslinker* yang terlibat (Yan dan Kyung, 2006). Selain itu, kestabilan MIP juga dipengaruhi oleh *binding energy* antara monomer dan template (Xuewen, et. al, 2015). Penentuan monomer fungsional yang tepat, desain rasio monomer-template, dan prediksi pelarut yang efektif untuk sintesis MIP dapat dilakukan melalui pendekatan komputasi. Metode ini sangat bermanfaat dalam upaya mengurangi *trial and error*, selain itu pendekatan komputasi memiliki beberapa keuntungan seperti harga yang murah, waktu pengerjaan yang singkat serta ramah lingkungan karena mengurangi penggunaan bahan kimia.

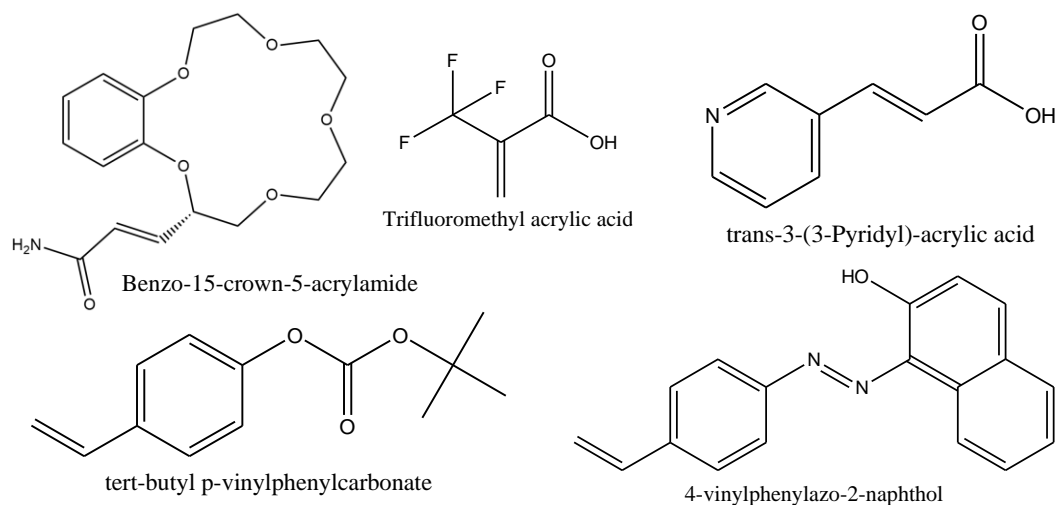
Pada penelitian ini dilakukan kajian pemilihan monomer fungsional (MF) terbaik sebelum dilakukan sintesis MIP ML melalui interaksi antara monomer-monomer fungsional dan ML menggunakan metode komputasi untuk memperoleh informasi yang memberikan pengaruh selektivitas dan kapasitas ikat MIP terhadap molekul target berupa *binding interaction*, *binding energy* dan momen dipole sebelum dilakukan sintesis di laboratorium.

## METODE PENELITIAN

### Bahan

Bahan yang digunakan untuk dimodelkan adalah data molekul ML dan data molekul Chen, et. al (2016) dan Karim. K, et. al (2005) sebanyak 24 molekul.





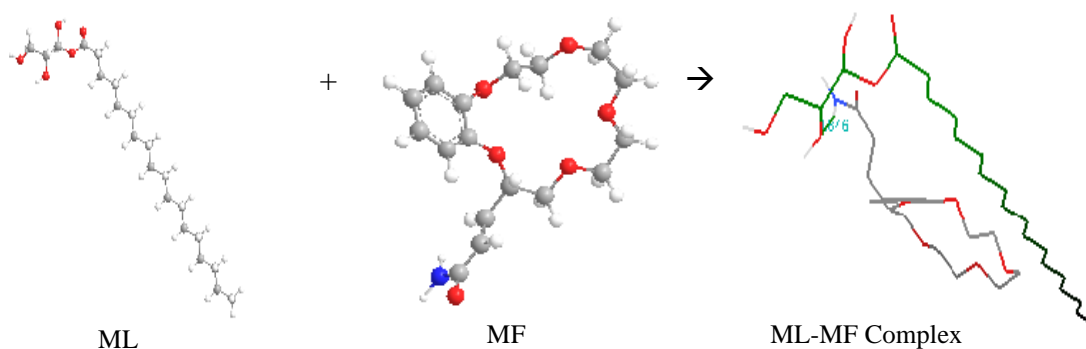
**Gambar 1.** Monomer fungsional yang dimodelkan

### Alat

Alat yang digunakan pada penelitian ini adalah seperangkat komputer dengan hardware: prosesor Intel Dual Core 2,66Ghz, RAM 2GB dan HDD 320GB dan Software: ChemBio Ultra 12, Pyrx dan AutoDock Tools 1.5.6.

### Prosedur

Data molekul ML dan semua data molekul Chen *et. al* (2016) dan Karim, *et. al* (2005) digambar serta dimodelkan dalam bentuk 3D kemudian dilakukan *minimize energy* menggunakan ChemBio Ultra 12. Selanjutnya interaksi antara monomer (MF) dengan template (ML) dikalkulasi menggunakan AutoDock Tools 1.5.6 dan Pyrx untuk melihat interaksi dan *binding energy* antara monomer dan template.



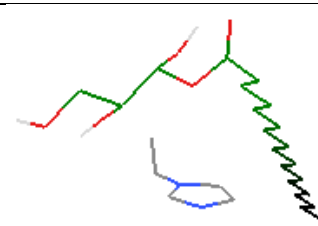
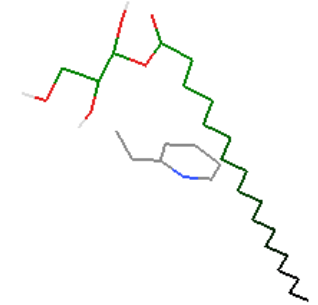
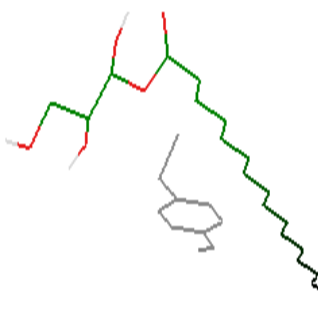
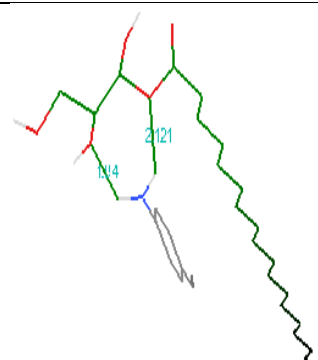
**Gambar 2.** Tahapan pemodelan yang dilakukan

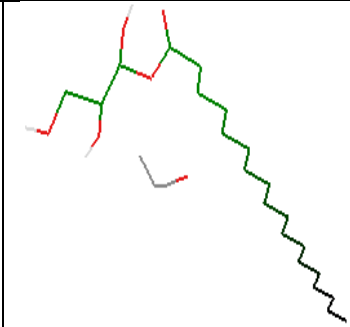
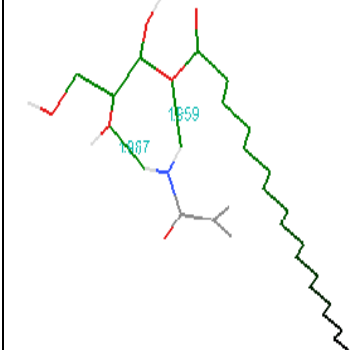
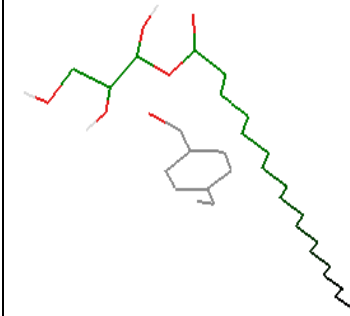

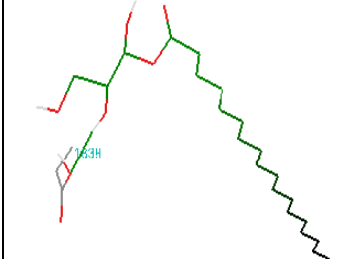
### HASIL DAN PEMBAHASAN

Proses memilih monomer fungsional untuk pembuatan MIP dengan template ML diperlukan beberapa parameter untuk memilih MF yang tepat. Beberapa variabel yang dapat memberikan pengaruh terhadap selektivitas dan kapasitas ikat (binding capacity) MIP diantaranya adalah interaksi antara molekul template, monomer fungsional dan *crosslinking agent* yang dapat dilihat dari ikatan hidrogen,

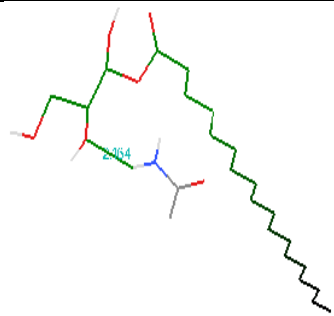
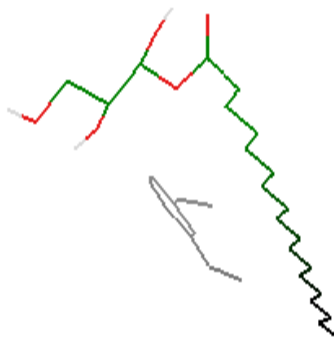

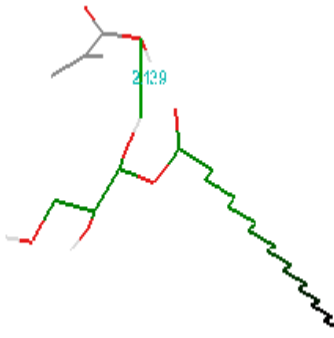
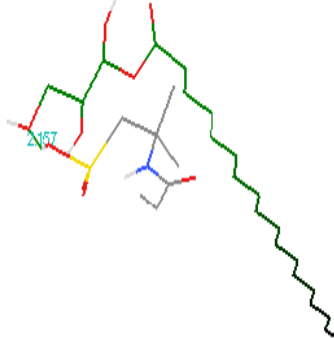
elektrostatik atau gaya vander waals dalam pembuatan MIP (Lorenzo, 2013). Interaksi non-kovalen lebih sering digunakan daripada interaksi kovalen karena tidak membutuhkan langkah sintesis untuk pembentukan polimer kompleks, interaksi antara monomer dan template lebih mudah terbentuk, pelepasan template setelah terbentuknya polimer yang dikehendaki lebih mudah (Amin, *et.al* 2018).

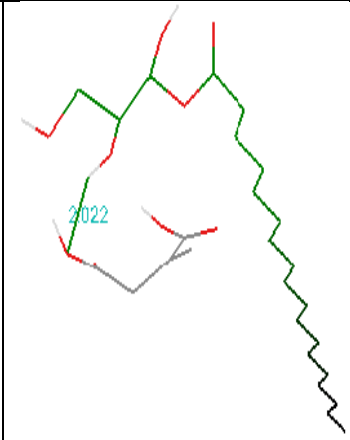
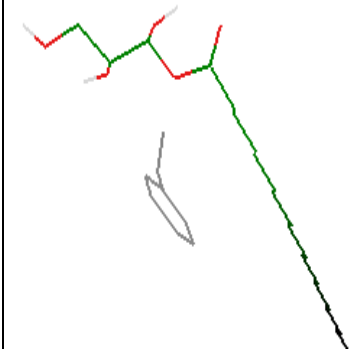
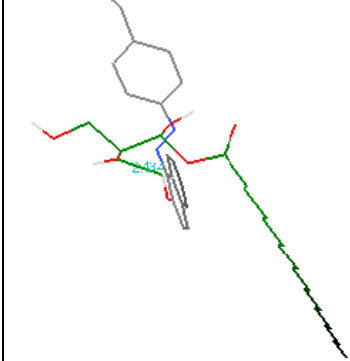
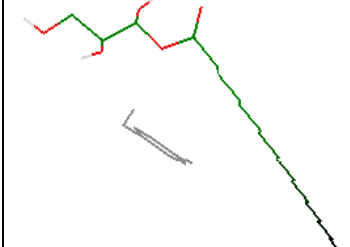
**Tabel 1.** Data hasil analisis kompleks *monomer-template*

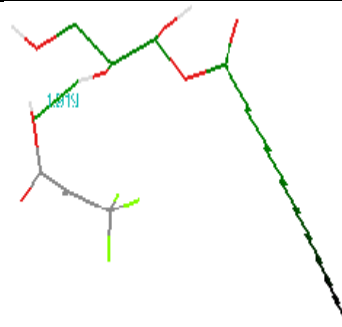
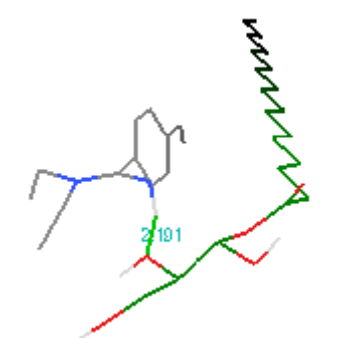
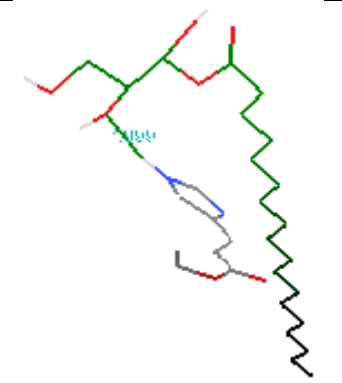

No.	Monomer	$\mu$ (debye)	<i>Binding Energy</i> (kcal/mol)	<i>Binding Interaction</i>	Gambar
1	1-Vinyl imidazole	3,73	-1,07	<i>no interaction</i>	
2	2-vinyl pyridine	1,84	-1,38	<i>no interaction</i>	
3	4-ethyl styrene	0,24	-1,5	<i>no interaction</i>	
4	4-vinyl aniline	1,92	-1,85	<i>hydrogen bond</i>	



5	Acrolein	2,36	-0,66	<i>no interaction</i>	
6	Methacrylamide	3,25	-1,58	<i>hydrogen bond</i>	
7	4-vinyl benzaldehyde	2,81	-1,36	<i>no interaction</i>	
8	Methyl methacrylate	1,79	-0,83	<i>hydrogen bond</i>	
9	Acrylic acid	0,31	-0,66	<i>hydrogen bond</i>	



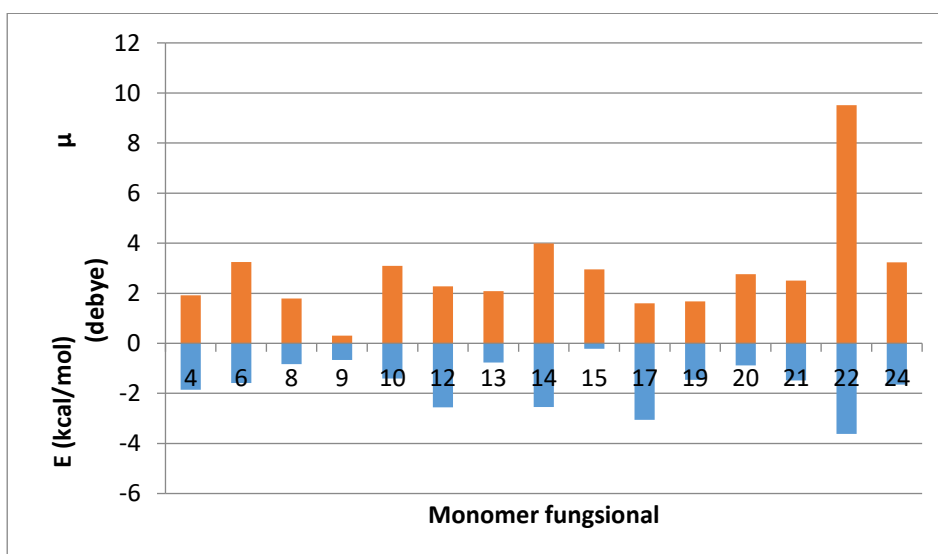
10	Acrylamide	3,10	-1,41	hydrogen bond	
11	m-divinyl benzene	0,02	-1,57	no interaction	
12	5-vinyl-8-hydroxyquinoline	2,28	-2,56	hydrogen bond	
13	Methacrylic acid	2,09	-0,77	hydrogen bond	
14	2-acrylamido-2-methyl-1-propane sulfonic acid	3,99	-2,55	hydrogen bond	

15	Itaconic acid	2,95	-0,22	hydrogen bond	
16	Styrene	0,02	-1,4	no interaction	
17	4-vinylphenylazo-2-naphthol	1,60	-3,06	hydrogen bond	
18	p-divinyl benzene	0,00	-1,5	no interaction	

19	Trifluoro methyl acrylic acid	1,68	-1,46	hydrogen bond	
20	N,N-diethyl-4-stryrylamidine	2,76	-0,88	hydrogen bond	
21	Uraconic ethyl ester	2,50	-1,48	hydrogen bond	
22	Benzo-15-crown-5-acrylamide	9,51	-3,62	hydrogen bond	

23	Tert-butylp-vinyl phenyl carbonate	3,30	-1,78	no interaction	
24	2-hydroxyethyl methacrylate	3,23	-1,65	hydrogen bond	

Berdasarkan tabel.1 penyeleksian monomer fungsional yang pertama dilakukan berdasarkan data *binding interaction*. Untuk monomer yang mempunyai *binding interaction* (ikatan hidrogen) yang merupakan bagian dari tahapan penting dalam proses sintesis polimer yang menunjukkan bentuk kompleks dari template dan monomer (Guć. M and Grzegorz. S, 2017) yaitu sebanyak 15 monomer yaitu monomer dengan nomor 4 (4-vinyl aniline), 6 (methacrylamide), 8 (methyl methacrylate), 9 (acrylic acid), 10 (acrylamide), 12 (5-vinyl-8-hydroxyquinoline), 13 (methacrylic acid), 14 (2-acrylamido-2-methyl-1-propane sulfonic acid), 15 (itaconic acid), 17 (4-vinylphenylazo-2-naphthol), 19 (trifluoro methyl acrylic acid), 20 (N,N-diethyl-4-styrylamidine), 21 (uraconic ethyl ester), 22 (benzo-15-crown-5-acrylamide), dan 24 (2-hydroxyethylmethacrylate).



Gambar 3. Grafik hubungan *binding energy* monomer-template terhadap momen dipol.

Seleksi selanjutnya dilakukan berdasarkan data *binding energy*. Dari ke 15 monomer tersebut yang mempunyai *binding energy* yang cukup besar ( $>-2$ ) yang dianggap akan memiliki ikatan paling stabil dalam pembuatan MIP (Fu Xuewen, *et. al*, 2015) adalah sebanyak empat monomer yaitu nomor 12 (5-vinyl-8-hydroxyquinoline), no 14 (2-acrylamido-2-methyl-1-propane sulfonic acid), no 17 (4-Vinylphenylazo-2-naphthol) dan no 22 (Benzo-15-crown-5-acrylamide). Momen dipol (debye) keempat monomer tersebut masing-masing sebesar 2,28 ;2,55; 1,6; 9,51 debye (Gambar 2) sedangkan momen dipol templatnya sendiri sebesar 1,6 debye. Dimana keempat monomer tersebut memiliki kemiripan sifat dengan template sehingga dapat berinteraksi secara polar (Saputra. A, *et. al*, 2013) dalam pembentukan MIP. Dari keempat yang monomer tersebut yang terbaik adalah monomer Benzo-15-crown-5-acrylamide karena memiliki *binding energy* paling besar dan nilai momen dipol paling besar.

### SIMPULAN

Monomer dengan nomor 22 (Benzo-15-crown-5-acrylamide) dipilih sebagai monomer fungsional terbaik dari keempat monomer lainnya berdasarkan nilai *binding energy* dan momen dipol paling besar serta mempunyai *binding interaction* berupa ikatan hidrogen yang secara teoritis dapat digunakan sebagai monomer fungsional dalam pembuatan MIP ML dengan selektivitas yang relatif cukup baik terhadap ML. Ketiga monomer lainnya yaitu nomor 12 (5-vinyl-8-hydroxyquinoline), 14 (2-acrylamido-2-methyl-1-propane sulfonic acid) dan 17 (4-vinylphenylazo-2-naphthol) dapat juga dijadikan monomer fungsional sebagai pembanding ataupun pertimbangan lainnya untuk dilanjutkan pada tahap sintesis MIP ML.

### DAFTAR PUSTAKA

- Amin. S., *et. al*, 2018, Synthesis and Characterization Molecularly Imprinted Polymers for Analysis of Dimethylamylamine Using Acrylamide as Monomer Functional, *Jurnal Kefarmasian Indonesia*, 8(2):76-84
- Chen. L., *et. al*, 2016, Molecular Imprinting: Perspectives and Applications Review Article, *Cem. Soc. Rev*, 45, 2137
- Guć. M and Grzegorz. S., 2017, The Molecularly Imprinted Polymers. Influence of Monomers on The Properties of Polymers - A Review, *World Journal of Research and Review (WJRR)*. 5(6): 36-47.
- Heliawati. L, 2004, Identifikasi Lemak Babi Dalam Daging Olahan Berdasarkan Derivat Triglisidanya Dengan Menggunakan Kromatografi Gas – Cairan, *Jurnal Aplikasi Sains*. 7(1) : 17-22.
- Karim. K., *et. al*, 2005, How to Find Effective Functional Monomers for Effective Molecularly Imprinted Polymers? *Advanced Drug Delivery Reviews* 57: 1795-1808.
- Lorenzo. C.A and Concherio A, 2013, *Handbook of Molecularly Imprinted Polymers*, United Kingdom, Smithers Rapra Technology.

- Rahayu. W.S. et. al, 2018, Application of FTIR Spectroscopy and Chemometrics for Halal Authentication of Beef Meatball Adulterated with Dog Meat, *Indones. J. chem.*, 18 (2): 376-381
- Saputra. A, et. al., 2013, Penggunaan Metode Semiempirik AM1 Untuk Pemilihan Monomer Fungsional Efektif Pada Prasintesis Polimer Tercetak Diazinon. *Valensi*, 3(1): (1-9)
- Xuewen. F. et. al., 2015, Template-Monomer Interaction in Molecular Imprinting: Is the Strongest the Best. *Open Journal of Organic Polymer Materials*. 5: 58-68
- Yan. H, dan Kyung H. R., 2006, Characteristic and Synthetic Approach of Molecularly Imprinted Polymer, *Int. J. Mol. Sci*, 7, 155-178.