

Analisis dinamika molekuler asam palmitat pada pelarut eutektik dalam deep eutectic solvents betain dan gliserol = Molecular dynamic analysis of palmitic acid in deep eutectic solvents of betaine and glycerol

Christian Yongky Jayadi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20412834&lokasi=lokal>

Abstrak

Pengembangan pelarut ramah lingkungan baru merupakan salah satu subjek kunci dalam kajian kimia ramah lingkungan. Cairan ionik dan pelarut eutektik dalam, telah mendapatkan perhatian besar untuk menggantikan pelarut organik keras yang sekarang digunakan dan telah diterapkan pada banyak proses seperti ekstraksi dan sintesis. Pada penelitian ini, digunakan senyawa betain dan gliserol. Penelitian secara langsung di laboratorium tanpa studi awalan (*in silico*) akan menghabiskan banyak waktu, tenaga dan biaya, oleh karena itu, dalam rangka untuk mempersingkat waktu eksperimen di laboratorium, dilakukan suatu percobaan melalui simulasi dinamika molekuler dengan menggunakan komputer berspesifikasi tinggi dan perangkat lunak Amber.

Simulasi dilakukan dengan tujuan untuk menemukan komposisi terbaik dari pelarut dan mencari interaksi asam palmitat dengan pelarut. Simulasi dilakukan dengan mencampur betain dan gliserol dengan perbandingan tertentu (1:1, 1:2 dan 2:3) pada suhu kamar (298 K) dan waktu simulasi selama 40 ns, kemudian membuat simulasi campuran antara betain, gliserol dan asam palmitat.

Setelah dilakukan beberapa simulasi didapatkan hasil bahwa antara betain dan gliserol dapat terbentuk ikatan hidrogen bercabang dua. Komposisi terbaik berada pada komposisi betain:gliserol 1:2 atau 2:3.

Campuran pelarut ini (terutama betain) juga terbukti mampu mengikat asam Palmitat dengan adanya ikatan hidrogen bercabang dua yang terbentuk.

.....

Developing new green solvents is one of the key subjects in green chemistry. Ionic Liquid and Deep Eutectic Solvents, have been paid great attention to replace current harsh organic solvents and have been applied to many chemical processing such as extraction and synthesis. In this research, Betaine and Glycerol are being used. Direct research at laboratory without simulation (*in silico*) studies will expensed many time, effort and money, so in the hope of reducing the time used to research at laboratory, the molecular dynamic simulation is used with the tools of supercomputer and Amber Molecular Dynamic software.

The simulation is aimed at finding the best ingredients of the solvents and find the interaction between solvents and palmitic acid. Simulation is conditioned with some composition of betaine and glycerol (1:1, 1:2, and 2:3) being run at 298K temperature and for 40 ns time. Simulations with composition of betaine, glycerol and palmitic acid are also performed.

After some simulations being done, the results gives indication that betaine and glycerol can make bifurcated hydrogen bonds. The best results came from betaine:glycerol composition of 1:2 and 2:3. This mixed solvent is also gives indication that it (especially betaine) can make bifurcated hydrogen bonds with Palmitic Acid.