

Optimisasi simulasi dinamika molekuler asam palmitat pada pelarut eutektik dalam deep eutectic solvent betain, gliserol, dan propilenglikol = Optimization of molecular dynamics simulation of palmitic acid in deep eutectic solvent mixture consisting of betaine glycerol and propyleneglycol

Michael Prajanto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20432173&lokasi=lokal>

Abstrak

Walaupun industri minyak kelapa sawit telah dikenal kontribusinya yang baik terhadap perekonomian, diketahui juga bahwa proses ekstraksi dalam industri tersebut memberi dampak negatif terhadap lingkungan, seperti destilasi uap yang membutuhkan banyak energi serta menyebabkan sebagian tokoferol ikut teruapkan bersama asam lemak bebas. Perhatian besar mulai ditujukan pada cairan ionik dan pelarut eutektik dalam (Deep Eutectic Solvents / DES), termasuk NADES (Natural Deep Eutectic Solvents), salah satunya dengan bahan dasar betain-polyol sebagai metode alternatif ekstraksi asam palmitat sewajarnya mulai dikembangkan untuk menggantikan metode destilasi uap. Percobaan melalui simulasi dinamika molekuler (MD) yang menggunakan piranti lunak AMBER ini berfungsi sebagai studi awalan dan komplementer terhadap penelitian in vitro.

Eksperimen berlangsung dalam berbagai perbandingan betain monohidrat dengan donor ikatan hidrogen (HBD) gliserol atau propilenglikol pada suhu percobaan, yaitu 313 K atau 323 K, dengan maupun tanpa disertai asam palmitat. Data energi total dipilih sebagai parameter utama baik atau tidaknya solvasi pelarut. Parameter lainnya adalah densitas, fungsi distribusi radial (RDF) dan analisis ikatan hidrogen.

Setelah simulasi, disimpulkan bahwa campuran Betain monohidrat- gliserol memiliki sifat solvasi yang lebih baik daripada Betain monohidrat- propilenglikol. Konsentrasi HBD yang digunakan juga berbanding lurus terhadap peningkatan energi total, sehingga campuran betain monohidrat-gliserol pada perbandingan 1:8 adalah campuran terbaik dalam eksperimen ini.

.....Despite the contributions the palm oil industry towards the economy, the palm oil extraction process is also known to deliver negative impacts on the enviroment. A large attention has been drawn onto ionic liquids and deep eutectic solvents (DES) to replace the steam destilation method, one that requires a large amount of energy and causing much of the desired tocopherol content vaporize together with the free fatty acids, so that a betaine-polyol based NADES (Natural Deep Eutectic Solvents) utilization as an alternative method to extract palmitic acid, needs to be developed. This molecular dynamics (MD) simulation, conducted using AMBER software, is aimed to be a pre- and complementary study to a in vitro experiment. The experiment is conducted in various concentration ratios of betaine monohydrate with glycerol and propyleneglycol as hydrogen bond donor (HBD) on experimental temperatures of 313 K or 323 K, with or without palmitic acid. The total energy data is chosen as the primary parameter of their solvation performance. Other parameters are density, radial distribution function (RDF), and hydrogen bond analysis. After the simulations, it is concluded that the Betaine monohydrate-glycerol NADES possesses an overall better solvation performance than its propyleneglycol counterpart. The HBD concentration used is also directly proportional towards total energy value, so that the betaine-glycerol NADES mixture at 1:8 concentration ratio holds the best results in this experiment.