

Studi Elektrokimia dan Komputasi Nanokomposit β -Siklodekstrin Termodifikasi Sitrat/ Fe_3O_4 Sebagai Sensor Non-Enzimatis untuk Kolesterol = Electrochemistry and Computational Studies of Citrate modified β -Cyclodextrin/ Fe_3O_4 Nanocomposite as Non-Enzymatic Sensor for Cholesterol

Nasution, Mochammad Arfin Fardiansyah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20502040&lokasi=lokal>

Abstrak

Penyakit kardiovaskular masih menjadi salah satu masalah kesehatan global dan merupakan penyebab kematian tertinggi di berbagai belahan dunia. Penyakit ini umumnya disebabkan oleh penyempitan pembuluh darah akibat penumpukan kolesterol. Untuk mendeteksi kolesterol umumnya digunakan biosensor yang menggunakan enzim sehingga memerlukan biaya yang mahal. Oleh karenanya, penelitian ini bertujuan untuk mengembangkan sensor non-enzimatis untuk kolesterol yang berbasis nanokomposit β -siklodekstrin termodifikasi sitrat (BCD-CIT) dengan nanopartikel Fe_3O_4 melalui studi elektrokimia dan komputasi. Pada penelitian ini, nanokomposit BCD-CIT/ Fe_3O_4 disintesis dengan menggunakan teknik ko-presipitasi dan hasil sintesis dikarakterisasi menggunakan instrumentasi SEM, XRD, dan FTIR, yang mengkonfirmasi bahwa partikel nanokomposit telah terbentuk dengan diameter 13,22 nm. Penentuan kadar kolesterol melalui studi elektrokimia dilakukan dengan menggunakan metode voltametri siklik (CV) dengan potensial -0,6 volt hingga +0,6 volt dan laju pindai (scan rate) 50 mV/s pada SPCE sebagai elektrodanya. Hasil pengukuran kadar kolesterol pada parameter optimum (jumlah nanokomposit 2 persen (w/w), waktu kontak 10 menit, PBS pH 7.4, dan konsentrasi MB 100 mM) diperoleh bahwa persamaan regresi untuk kurva kalibrasi untuk puncak arus anodik dan puncak arus katodik pada konsentrasi 0-125 μM diperoleh dengan linieritas yang baik ($R^2 > 0.97$). Selain itu, sensor menunjukkan sensitivitas yang tinggi, dilihat dari kemiringan slope yang dihasilkan. Dari studi komputasi dapat dikonfirmasi bahwa senyawa kolesterol membentuk kompleks inklusi dengan BCD-CIT dan BCD yang lebih stabil dibandingkan dengan senyawa metilen biru dan interferensi lainnya, dimana hasil simulasi penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa kolesterol secara berturut-turut memiliki energi binding sebesar -6,4 kcal/mol dan -5,7 kcal/mol. Pada akhirnya, sensor non-enzimatis yang dikembangkan pada penelitian ini akan diujicobakan terhadap yogurt sebagai sampel untuk mengetahui kemampuan sensor ini pada sampel nyata.

Cardiovascular disease (CVD) still remains as a major global health problems and currently ranks as the highest cause of death in various parts of the world, CVD is generally caused by narrowing of blood vessels due to cholesterol buildup. However, the cholesterol sensor that commonly used today are enzyme-based, which require specific treatments and expensive. This research aims to develop non-enzymatic sensors for cholesterol based on citrate modified β -cyclodextrin (BCD-CIT) and Fe_3O_4 nanocomposite using electrochemical and computational studies. In this study, BCD-CIT/ Fe_3O_4 nanocomposite was successfully synthesized using co-precipitation technique, which the characterization results from SEM, XRD, and FTIR confirmed the formation of the nanoparticles with a diameter of 13.22 nm. Moreover, the determination of cholesterol levels through electrochemical studies was carried out using the cyclic voltammetry method (CV) with a potential of -0.6 volts to +0.6 volts and scan rate of 50 mV/s at SPCE as the electrodes. The

measurement results at optimized parameters (2% (w/w) nanocomposite weight, contact time of 10 minutes, PBS pH 7.4, and MB concentration of 100 mM) in the cholesterol concentration ranged at 0-125 uM showed that the calibration curve of anodic and cathodic peak current were obtained with good linearity ($R^2 > 0.97$). In addition, the sensor also exhibited high sensitivity, judged from the slope that resulted from the calibration curve. Furthermore, the computational study through molecular docking simulation confirmed that cholesterol formed the most stable complexes with both BCD and BCD-CIT compared to other compounds, including methylene blue and its interference, which ΔG binding of the complexes was obtained at -6.4 kcal/mol and -5.7 kcal/mol, respectively. Finally, this non-enzymatic sensor which developed in this study will be tested further on yogurt to assess the capability and selectivity of BCD-CIT/Fe₃O₄ nanocomposite as the cholesterol sensor.