



FORUM GURU BESAR
INSTITUT TEKNOLOGI BANDUNG



Orasi Ilmiah Guru Besar Institut Teknologi Bandung



Inovasi Polimer Tercetak Molekul untuk Analisis Mutu Obat Prediksi Komputasi, Sintesis, dan Aplikasi

Profesor Sophi Damayanti

**Sekolah Farmasi
Institut Teknologi Bandung**

**Aula Barat ITB
12 Oktober 2024**

Orasi Ilmiah Guru Besar
Institut Teknologi Bandung

**Inovasi Polimer Tercetak Molekul
untuk Analisis Mutu Obat**
Prediksi Komputasi, Sintesis, dan Aplikasi

Orasi ilmiah Guru Besar
Institut Teknologi Bandung

**Inovasi Polimer Tercetak Molekul
untuk Analisis Mutu Obat**
Prediksi Komputasi, Sintesis, dan Aplikasi

Prof. Sophi Damayanti

12 Oktober 2024
Aula Barat ITB



Hak cipta © pada penulis dan dilindungi Undang-Undang

Hak penerbitan pada ITB Press

Dilarang memperbanyak sebagian atau seluruh bagian dari buku ini tanpa izin dari penerbit

Orasi ilmiah Guru Besar Institut Teknologi Bandung:

***Inovasi Polimer Tercetak Molekul untuk Analisis Mutu Obat:
Prediksi Komputasi, Sintesis, dan Aplikasi***

Penulis : Prof. Sophi Damayanti

Penelaah : Prof. Slamet Ibrahim Surantaatmaja

Editor Bahasa : Rina Lestari

Cetakan I : 2024

ISBN : 978-623-297-593-4

e-ISBN : 978-623-297-594-1 (PDF)

ITB PRESS

📍 Gedung STP ITB, Lantai 1,
Jl. Ganesa No. 15F Bandung 40132
☎ +62 22 20469057
🌐 www.itbpress.id
✉ office@itbpress.id
Anggota Ikapi No. 043/JBA/92
APPTI No. 005.062.1.10.2018

PRAKATA

Puji dan syukur disampaikan ke hadirat Allah Swt., atas perkenan-Nya buku *Inovasi Polimer Tercetak Molekul untuk Analisis Mutu Obat: Prediksi Komputasi, Sintesis, dan Aplikasi* ini dapat hadir sebagai tulisan untuk orasi ilmiah Guru Besar ITB.

Penjaminan mutu obat tidak dapat dilepaskan dari metode analisis yang digunakan untuk melakukan evaluasi produk obat tersebut. Berbagai kemajuan ilmu pengetahuan telah menghasilkan metode analisis yang memudahkan untuk menguji mutu obat. Beragam jenis sampel adalah tantangan yang harus dipecahkan sehingga bahan selain analit yang akan ditentukan tidak mengganggu pengukuran.

Buku ini akan menjabarkan perkembangan metode analisis pada bidang farmasi dengan penekanan pada berbagai proses preparasi sampel dan aplikasinya.

Ucapan terima kasih disampaikan kepada Prof. Dr. Slamet Ibrahim Surantaatmaja, Alumni Mahasiswa Bimbingan Program Doktor, Kelompok Keilmuan Farmakokimia, Sekolah Farmasi, Forum Guru Besar, Majelis Wali Amanat dan Rektorat Institut Teknologi Bandung yang mendukung terbitnya buku orasi ilmiah ini.

Kehadiran buku ini tentunya tidak luput dari kekurangan. Kiranya masukan dan saran untuk perbaikan buku ini sangat diharapkan. Besar harapan buku ini dapat memberikan manfaat dan menambah ilmu bagi yang membacanya.

Bandung, 12 Oktober 2024

Sophi Damayanti

Make things easy for the people, and do not make it difficult for them. The best of human are those who are most beneficial to others (PBUH).

Life is hard enough, don't make it harder.

SINOPSIS

Kualitas obat adalah satu hal yang tidak dapat diabaikan karena berhubungan dengan efikasi dan keamanan obat terhadap pasien. Pada saat diproduksi, obat harus dibuat dengan mengikuti CPOB, yaitu Cara Pembuatan Obat Yang Baik. Obat harus memenuhi semua persyaratan mutu yang ditetapkan oleh Farmakope Indonesia atau standar lain yang telah ditetapkan. Buku ini menjelaskan peranan analisis farmasi dalam menunjang kualitas obat dalam pengembangan metode pemisahan. Sebagai pendahuluan, pada bab awal dijelaskan mengenai mutu dan panduan dalam Farmasi yang dilanjutkan dengan metode analisis untuk bahan baku dan sediaan farmasi berupa obat sebagai objek pengawasan kualitas dengan menyertakan pengantar teori dari masing-masing metode. Selanjutnya, kompleksitas matriks dalam pengujian obat memberikan tantangan pengembangan metode preparasi sampel yang dijelaskan dengan pengembangan Polimer Tercetak Molekul atau dalam pustaka internasional disebut dengan *Molecularly Imprinted Polymer* (selanjutnya akan digunakan singkatan MIP), yang dilanjutkan dengan pemaparan mulai dari metode komputasi, sintesis dan aplikasinya yang digunakan untuk analisis obat dalam berbagai matriks. Aplikasi dijelaskan dengan penelitian yang dilakukan bersama dengan para bimbingan mahasiswa program doktor.

DAFTAR ISI

PRAKATA.....	V
SINOPSIS	VII
DAFTAR ISI.....	IX
DAFTAR GAMBAR.....	XI
DAFTAR TABEL.....	XV
1 PENDAHULUAN.....	1
2 PENJAMINAN MUTU OBAT.....	5
3 PREPARASI SAMPEL.....	11
4 POLIMER TERCETAK MOLEKUL: PREDIKSI KOMPUTASI DAN SINTESIS.....	15
4.1 Sintesis dan Proses Pembuatan Polimer Tercetak Molekul.....	15
4.2 Faktor Penentu Keberhasilan Sintesis Polimer Tercetak Molekul.....	17
5 PENELITIAN POLIMER TERCETAK MOLEKUL	19
5.1 Pengembangan dan Karakterisasi Polimer Tercetak Molekul dan Nanokomposit Tercetak Molekul sebagai Kandidat Sorben Selektif untuk Analisis Sofosbuvir dalam Plasma Dara...	19
5.2 Sintesis, Karakterisasi, dan Aplikasi Polimer Tercetak Molekul untuk Ekstraksi Beberapa Antijamur Triazol dalam Plasma Darah	27
5.3 Sintesis, Karakterisasi, dan Aplikasi Polimer Tercetak Molekul untuk Analisis Enoksaparin dalam Matriks Biologis	38
5.4 Publikasi mengenai Penelitian Polimer Tercetak Molekul	47
6 TANTANGAN KE DEPAN.....	57
7 DAFTAR PUSTAKA	59
UCAPAN TERIMA KASIH.....	67
CURRICULUM VITAE	75

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Langkah rancangan mutu bahan baku obat.	9
Gambar 2.2	Langkah rancangan mutu sediaan obat.	9
Gambar 5.1	Kromatogram larutan standar SOF dan RMD	20
Gambar 5.2	Spektrum FTIR MIP A, NIP A (a) dan MIP B, NIP B (b) disintesis dengan metode presipitasi; MIP C, NIP C (c) dan MIP D, NIP D (d) disintesis dengan metode ruah	21
Gambar 5.3	Spektrum FTIR Ag@MIP1420 dan Ag@NIP0420 (a); Ag@MIP1120 dan Ag@NIP0120 (b) disintesis dengan metode presipitasi	21
Gambar 5.4	Hasil pengujian SEM untuk mikroskopis MIP A, B (a, c) and NIP A, B (b, d) dengan metode presipitasi; perbesaran 5.00k; MIP C, D (e, g) and NIP C, D (f, h) dengan metode ruah; perbesaran 20.0k.....	22
Gambar 5.5	Hasil pengujian SEM untuk mikroskopis Ag@MIP 1420 (a, e), Ag@MIP 1120 (b, d), Ag@NIP0420 (c), dan Ag@NIP0120 (d) dengan metode presipitasi; perbesaran 5.00k	23
Gambar 5.6	Hasil karakterisasi TG untuk polimer yang disintesis dengan metode ruah	23
Gambar 5.7	Hasil karakterisasi TG untuk polimer yang disintesis dengan metode presipitasi.....	24
Gambar 5.8	Kurva TG untuk Ag@MIP1420 dan Ag@MIP1120	24
Gambar 5.9	Hasil karakterisasi Ag@MIP dengan (a) XRD; (b) EDS mapping.....	24
Gambar 5.10	Kemampuan adsorpsi MIP A, NIP A dan MIP B and NIP B (n=3).....	25
Gambar 5.11	Kemampuan adsorpsi of MIP C, NIP C dan MIP D and NIP D (n=3).....	25
Gambar 5.12	Hasil energi bebas pengikatan kompleks dari simulasi penambatan molekul	28
Gambar 5.13	Energi kompleksasi dan energi bebas Gibbs kompleks	28

Gambar 5.14 Energi kompleksasi dalam kondisi vakum dan terlarut (atas) dan pengaruh konsentrasi monomer terhadap energi kompleksasi (bawah) 29

Gambar 5.15 Kromatogram hasil optimasi 31

Gambar 5.16 Kapasitas adsorpsi MIP dan NIP (n=3) 31

Gambar 5.17 Pengaruh pelarut (atas) dan rasio sintesis (bawah) (n=3) 32

Gambar 5.18 Kinetika adsorpsi MIP 32

Gambar 5.19 Overlay spektrum IR VOR (hitam), ITR (merah), MIP sebelum ekstraksi (biru), MIP setelah ekstraksi (ungu), dan NIP (hijau). 33

Gambar 5.20 Luas permukaan dan diameter pori MIP dan NIP 33

Gambar 5.21 Analisis SEM MIP-P9 sebelum ekstraksi (a), setelah ekstraksi (b), NIP-P10 (c), dan MIP-B9 (d) 34

Gambar 5.22 Ukuran partikel MIP dan NIP 34

Gambar 5.23 Analisis TGA VOR (hitam), IR (hijau), MIP sebelum ekstraksi (oranye), MIP setelah ekstraksi (kuning), dan NIP (biru) 34

Gambar 5.24 Optimasi sistem MISPE (n=3) 35

Gambar 5.25 Efisiensi ekstraksi (n=3) 36

Gambar 5.26 Pengujian volume breakthrough 36

Gambar 5.27 Pengujian keberulangan pemakaian (n=3) 36

Gambar 5.28 Perolehan kembali MISPE, NISPE, dan SPE C₁₈ (n=3) 37

Gambar 5.29 Kromatogram spiked plasma tanpa preparasi MISPE (atas), dengan MISPE (bawah) 37

Gambar 5.30 Hasil perhitungan (A) RMSD, (B) R_g, dan (C) interaksi ikatan hidrogen antara enoksaparin dengan asam itakonat dari perbandingan 1:1 sampai 1:10 menggunakan simulasi dinamika molekular. 40

Gambar 5.31 Kromatogram air, enoksaparin 500 mg/L, dan heparin 500 mg/L 40

Gambar 5.32 Percobaan perbandingan molar enoksaparin dengan asam itakonat. (A) Pelarut untuk enoksaparin, (B) perhitungan polinomial, dan (C) perpotongan dua garis regresi. 41

Gambar 5.33 Spektrum FTIR (A) disintesis dengan *microwave* (B) disintesis dengan *stirrer* 42

Gambar 5.34	Hasil SEM metode <i>microwave</i> sebelum pelepasan (A) NIP 1:1, (B) NIP 1:4, (C) NIP 1:6, (D) MIP 1:1, (E) MIP 1:4, (F) MIP 1:6.....	42
Gambar 5.35	Hasil SEM metode <i>microwave</i> dan <i>stirrer</i> (A) NIPM, (B) MIPM, (C) MIPM setelah pelepasan, (D) NIPS, (E) MIPS, (F) MIPS setelah pelepasan	42
Gambar 5.36	Karakterisasi TGA enoksaparin	43
Gambar 5.37	Karakterisasi TGA NIP, MIP dan MIP setelah pelepasan (A) <i>microwave</i> , (B) <i>stirrer</i>	43
Gambar 5.38	Hasil pengujian PSA (A)MIPM, (B)NIPM, (C)MIPS, dan (D)NIPS	43
Gambar 5.39	Hasil pengujian zeta potensial	44
Gambar 5.40	Histogram % <i>recovery</i> enoksaparin menggunakan MIP	45
Gambar 5.41	Histogram % <i>recovery</i> pemakaian berulang MIPM	46

DAFTAR TABEL

Tabel 1.1	Analisis Kualitatif dan Kuantitatif	2
Tabel 5.1	Hasil pengujian adsorpsi BET untuk polimer MIP dan Ag@MIP bercetakan SOF.	26
Tabel 5.2	Kondisi sintesis optimal	30
Tabel 5.3	Hasil karakterisasi dengan BET.....	44

1 PENDAHULUAN

“Corpora non agunt nisi fixata”

Kalimat yang dipopulerkan oleh Paul Ehrlich (814-1915) menyebutkan bahwa tidak ada aktivitas tanpa adanya keterikatan. Kalimat ini tidak hanya dapat diterapkan pada interaksi obat dan targetnya tetapi dapat juga dikorelasikan dalam analisis farmasi. Teknik pemisahan harus dapat membuat interaksi dan menarik zat aktif agar terbebas dari matriksnya. Kalimat ini menjadi titik awal penyusunan buku ini.

Berdasarkan UU No. 17, Tahun 2023 tentang Kesehatan, Pasal 1, Obat adalah bahan, paduan bahan, termasuk produk biologi, yang digunakan untuk memengaruhi atau menyelidiki sistem fisiologi atau keadaan patologi dalam rangka penetapan diagnosis, pencegahan, penyembuhan, pemulihan, peningkatan kesehatan, dan kontrasepsi untuk manusia. Sedangkan pada pasal 142, menyatakan bahwa sediaan farmasi berupa obat dan bahan baku obat harus memenuhi standar atau persyaratan Farmakope Indonesia atau buku standar lainnya.

Pengawasan diperlukan dalam menjaga mutu sediaan farmasi berupa obat. Seorang ahli Farmasi sudah seharusnya mampu mengerti dan memahami istilah penjaminan mutu dan menerapkannya dalam produksi obat, mampu merancang pengawasan mutu bahan baku dan sediaan farmasi sesuai dengan peraturan perundangan Farmasi dan Kesehatan dan mampu berkomunikasi dengan siapapun berkaitan dengan mutu obat, pengawasan dan penjaminan mutu obat.

Proses pengawasan mutu dimulai dengan pemilihan metode analisis untuk digunakan pada tujuan analisis yang sesuai yaitu identifikasi, uji kemurnian dan penetapan kadar bahan aktif dalam bahan obat maupun sediaan.

Wawasan dan pengalaman dalam penggunaan berbagai metode analisis dalam pengawasan mutu baik bahan baku maupun sediaan farmasi perlu terus dipahami dan diperluas.

Analisis atau disebut juga pengujian merupakan proses yang melibatkan penetapan dan pengukuran suatu karakteristik bahan yang diuji serta

penilaian terhadap suatu standar tertentu untuk mengevaluasi tingkat kualitas dari bahan tersebut.

Analisis menjawab pertanyaan dua dasar dari keingintahuan manusia tentang bahan, yaitu apa yang ada dalam bahan (kualitatif) dan berapa banyak bahan tersebut (kuantitatif) (Watson, 2012).

Rancangan pengawasan mutu bahan baku atau sediaan obat umumnya dilakukan dengan cara analisis kualitatif dan analisis kuantitatif seperti yang dijelaskan dalam Tabel 1.1.

Tabel 1.1 Analisis Kualitatif dan Kuantitatif

ANALISIS KUALITATIF	ANALISIS KUANTITATIF
Berkaitan dengan identifikasi	Berkaitan dengan kadar
Menjawab pertanyaan “Apa”	Menjawab pertanyaan “Berapa”
<i>What chemicals are present</i>	<i>How much of one or more constituent is present</i>

Sampel uji terdiri atas analit dan matriks. Analisis yang dilakukan harus memenuhi syarat selektivitas dan sensitivitas agar dapat mengukur analit yang dituju. Preparasi sampel yang mencakup pemisahan analit dari matriks menjadi salah satu langkah yang signifikan dalam menunjang ketepatan analisis.

Metode pemisahan analisis yang dimulai dengan pemisahan sederhana berbasis perbedaan kelarutan hingga metode pemisahan yang lebih modern telah dikembangkan.

Penelitian dengan menggunakan metode komputasi telah banyak digunakan. Peneliti di bidang Kimia Komputasi, yaitu Martin Karplus, Michael Levitt, dan Arieh Warshel pun telah mendapatkan hadiah Nobel Bidang Kimia tahun 2013 atas pengembangan model multiskala untuk sistem kimia kompleks. Ketiganya adalah ahli kimia molekul.

Metode komputasi telah membantu dalam hal skrining untuk mengambil keputusan langkah selanjutnya yang dapat mengurangi langkah dan biaya penelitian yang tidak perlu. Prediksi komputasi, sintesis, dan aplikasi dari penggunaan MIP perlu terus dikembangkan untuk memastikan analisis obat yang terpercaya.

Oleh karena itu, tujuan penyusunan buku ini adalah untuk membahas Polimer Tercetak Molekul atau *Molecularly Imprinted Polymer* (MIP, selanjutnya digunakan singkatan ini) yang merupakan salah satu teknik yang digunakan untuk pemisahan analit dalam matriks yang kompleks.

2 PENJAMINAN MUTU OBAT

Konsep mutu dalam dunia bisnis industri penghasil produk dan jasa saling bersaing dalam tiga hal, yaitu harga, penyampaian, dan mutu. Harga dan penyampaian sangat tergantung pada faktor luar industri seperti situasi moneter, daya beli masyarakat dan kondisi geografik. Sedang mutu produk dan jasa sepenuhnya tergantung pada industri itu sendiri. Hanya produk dan jasa yang bermutu yang memenangkan persaingan bisnis sehingga eksistensi dan posisinya dapat bertahan di perdagangan (Martin, dkk., 2020).

Mutu atau kualitas (*quality*) didefinisikan secara sederhana sebagai pemenuhan persyaratan konsumen (*meeting the requirement of the costumers*). Juran menyebutkan bahwa mutu adalah kesesuaian dengan tujuan/manfaat. SNI 19-8402-1991/ISO 8402 menyatakan mutu adalah keseluruhan sifat dan karakter produk atau jasa yang mampu memuaskan kebutuhan yang jelas ataupun tersamar dinyatakan. Deming menjelaskan bahwa mutu dapat memenuhi kebutuhan konsumen sekarang dan masa yang akan datang (Saunders dkk, 1994). Phillip Crosby yang dikenal sebagai guru manajemen mutu menyatakan bahwa mutu harus menunjukkan kesesuaian dengan persyaratan (Crosby, 1979). Pernyataan ini berkaitan dengan mutu obat yang harus dijaga dan dibatasi dengan persyaratan untuk keamanan pasien.

Proses yang bermutu dan terkendali akan menghasilkan produk yang bermutu pula. Dokumentasi berguna untuk meningkatkan dan mempertahankan mutu produk dan mencegah kegagalan. Proses yang tidak sesuai dapat dihindarkan (*error-free work*), serta produk yang dihasilkan menjadi *zero defects*.

Pencegahan terjadinya kegagalan proses dalam pembuatan obat dapat dilakukan jika proses masukan, proses dan keluaran telah memenuhi dan terdokumentasi dengan baik.

BPOM telah mengeluarkan Peraturan No. 7 Tahun 2024 mengenai Cara Pembuatan Obat yang Baik (CPOB) yang dimaksudkan untuk memastikan obat dan bahan obat yang beredar di masyarakat telah memenuhi standar dan/atau persyaratan keamanan, khasiat, dan mutu.

Cara Pembuatan Obat yang Baik adalah cara pembuatan obat dan/atau bahan obat yang bertujuan untuk memastikan agar mutu obat dan/atau bahan

obat yang dihasilkan sesuai dengan persyaratan dan tujuan penggunaan. Industri Farmasi adalah badan usaha yang memiliki izin sesuai dengan ketentuan peraturan perundang-undangan untuk melakukan kegiatan pembuatan obat atau bahan obat. Industri Farmasi yang telah memenuhi persyaratan mendapatkan sertifikat CPOB sehingga bisa melakukan produksi (CPOB, 2024).

Standar CPOB pada peraturan tersebut meliputi: sistem mutu Industri Farmasi; personalia; bangunan dan fasilitas; peralatan; produksi; cara penyimpanan dan pengiriman obat yang baik; pengawasan mutu; inspeksi diri; keluhan dan penarikan produk; dokumentasi; kegiatan alih daya; kualifikasi dan validasi; pembuatan produk steril; pembuatan produk terapi khusus (*advance therapy medicinal product*); pembuatan bahan aktif biologis dan produk biologi; pembuatan gas medisinal; pembuatan inhalasi dosis terukur bertekanan; pembuatan produk darah; pembuatan obat uji klinik; sistem komputerisasi; cara pembuatan bahan baku aktif obat yang baik; pembuatan radiofarmaka; penggunaan radiasi pengion dalam pembuatan obat; sampel pembanding dan sampel pertinggal; pelulusan *real time* dan pelulusan parametris; manajemen risiko mutu; dan ketentuan khusus narkotika, psikotropika dan prekursor Farmasi (CPOB, 2024).

Pengawasan mutu juga diatur dalam CPOB. Pengawasan Mutu adalah bagian dari CPOB yang mencakup pengambilan sampel, spesifikasi dan pengujian, serta mencakup organisasi, dokumentasi dan prosedur pelulusan yang memastikan bahwa pengujian yang diperlukan dan relevan telah dilakukan. Bahan tidak boleh diluluskan untuk digunakan dan produk tidak boleh diluluskan untuk dijual atau didistribusi sampai mutunya dinilai memuaskan (CPOB, 2024).

Prinsip dasar Pengawasan Mutu yang diatur CPOB adalah (CPOB, 2024):

- a) Fasilitas memadai, personel terlatih dan tersedia prosedur yang disetujui untuk pengambilan sampel, pemeriksaan dan pengujian bahan awal, bahan pengemas, produk antara, produk ruahan dan produk jadi, dan bila perlu untuk pemantauan kondisi lingkungan dan sesuai tujuan CPOB;
- b) Pengambilan sampel bahan awal, bahan pengemas, produk antara, produk ruahan dan produk jadi dilakukan oleh personel yang ditetapkan dan menggunakan metode yang disetujui;
- c) Metode pengujian telah tervalidasi;

- d) Pencatatan dilakukan secara manual dan/atau dengan alat pencatat selama pembuatan yang menunjukkan bahwa semua langkah yang dipersyaratkan dalam prosedur pengambilan sampel, pemeriksaan dan pengujian benar-benar telah dilaksanakan. Tiap penyimpangan dicatat lengkap dan diinvestigasi;
- e) Produk jadi berisi zat aktif dengan komposisi secara kualitatif dan kuantitatif sesuai dengan yang tercantum dalam Izin Edar atau Persetujuan Uji Klinik, memiliki derajat kemurnian yang dipersyaratkan serta dikemas dalam wadah yang sesuai dan pelabelan yang benar;
- f) Dibuat catatan hasil pemeriksaan dan pengujian bahan awal, bahan pengemas, produk antara, produk ruahan, dan produk jadi yang secara formal dinilai terhadap spesifikasi; dan
- g) Sampel pertinggal bahan awal dan produk jadi disimpan dalam jumlah yang cukup sesuai Aneks 11 Sampel Pembanding dan Sampel Pertinggal, untuk pengujian ulang di kemudian hari bila perlu. Sampel produk jadi disimpan dalam kemasan akhir.

Farmakope adalah sebuah buku yang berisi kumpulan standar dalam bidang Farmasi terutama bahan baku obat serta sediaan jadinya, produk biologi, alat kesehatan, metode analisis, prosedur, dan instrumennya, bahan baku pembanding, sediaan umum dan penerapan standar yang berkaitan dengan standarisasi di bidang Farmasi. Buku-buku standar tersebut dikeluarkan dan ditetapkan oleh suatu badan resmi.

Farmakope Indonesia diakui secara hukum di Indonesia. Peraturan perundang-undangan mendukung penerapan Farmakope Indonesia sebagai standar mutu sesuai dengan Undang-Undang Republik Indonesia No. 17 Tahun 2023 bahwa Sediaan Farmasi yang berupa obat dan bahan baku obat harus memenuhi standar atau persyaratan Farmakope Indonesia atau buku standar lainnya.

Farmakope Indonesia Edisi VI tahun 2020 berisi ketentuan umum, monografi sediaan umum, monografi bahan obat dan obat. Di samping itu, terdapat lampiran yang merupakan informasi dan penjelasan dari metode analisis dan prosedur pengujian yang terdapat dalam monografi, mencakup pengujian dan penetapan secara umum, mikrobiologi, biologi, kimia, dan fisika (FI VI, 2020).

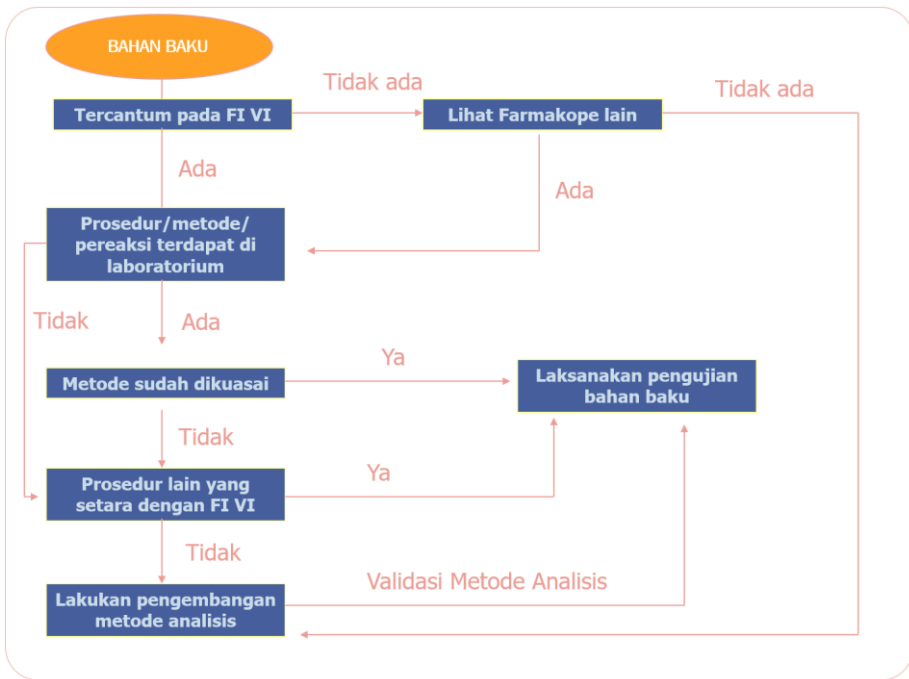
Dalam monografi yang terdapat dalam Farmakope terdiri atas nama resmi farmakope; rumus molekul, struktur dan nama kimia resmi, Berat Molekul (BM); pernyataan kadar atau potensi bahan aktif dalam bahan baku atau sediaannya; pemerian atau uraian dari segi organoleptik bahan; kelarutan dalam berbagai pelarut. Secara umum terbagi dalam identifikasi, syarat atribut mutu/tetapan fisika, kemurnian, penetapan kadar/potensi dan evaluasi sediaan (FI VI, 2020).

Implikasi dengan adanya Farmakope maka semua bahan obat dan Sediaan Farmasi resmi dan beredar di wilayah Indonesia harus memenuhi persyaratan identitas, kadar, atribut mutu dan kemurnian yang tercantum dalam monografi FI.

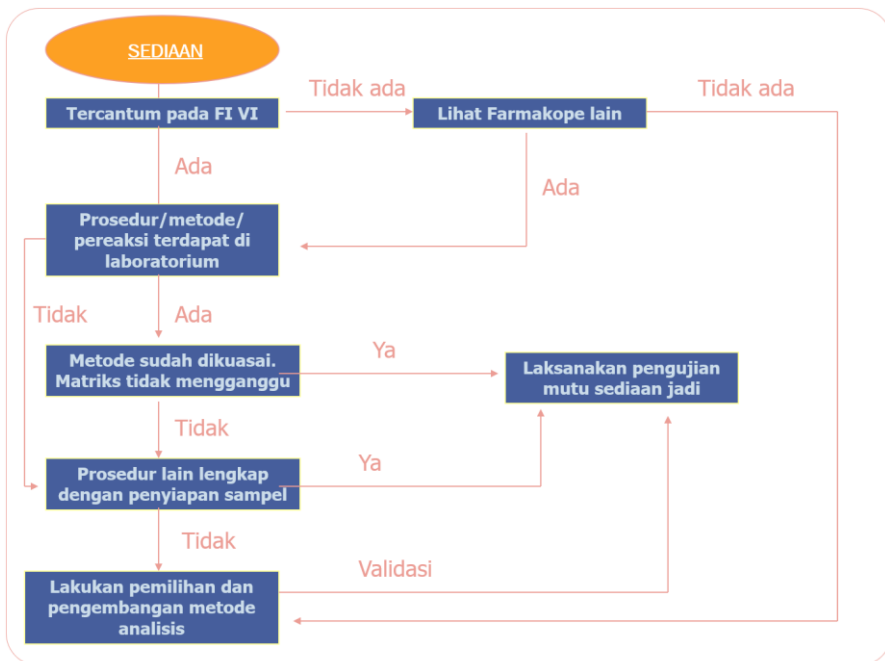
Pengujian mutu yang menggunakan metode dan prosedur lain di luar Farmakope dapat digunakan asalkan dapat dibuktikan ketelitian dan ketepatannya paling sedikit sama dengan metode dan prosedur farmakope melalui suatu verifikasi metode.

Bahan baku obat adalah senyawa aktif atau *Active Pharmaceutical Ingredient* yang dapat memicu terjadinya aktivitas biologi dalam organisme hidup. Pengujian mutu bahan baku obat bertujuan menetapkan kesesuaian dengan persyaratan bahan baku obat meliputi: identitas, atribut mutu, kemurnian, dan kadar. Sediaan farmasi adalah paduan bahan aktif dan eksipien. Pengujian sediaan meliputi identifikasi, kemurnian, penetapan kadar dan evaluasi sediaan. Bentuk Sediaan Farmasi antara lain aerosol, emulsi, ekstrak, ekstrak cair, gel, implant, immunoserum, inhalasi, injeksi, irigasi, kapsul, krim, larutan, pasta, plester, sediaan obat mata, serbuk, supositoria, suspensi, salep, tablet, dan vaksin.

Pengujian bahan baku dan sediaan dilakukan dengan menggunakan metode, prosedur dan instrumen yang tercantum dalam monografi Farmakope Indonesia. Apabila tidak tercantum dalam FI VI, maka dapat digunakan persyaratan dari Farmakope lainnya seperti: United States Pharmacopeia (USP), British Pharmacopoeia (BP), Japanese Pharmacopoeia (JP), European Pharmacopoeia (Ph. Eur.), The International Pharmacopoeia (Ph. Int.), dan lain-lain. Jika tidak tercantum, maka diperlukan pengembangan dan validasi metode baru (Gambar 3.1 dan Gambar 3.2) (Ibrahim, 2020).



Gambar 2.1 Langkah rancangan mutu bahan baku obat.



Gambar 2.2 Langkah rancangan mutu sediaan obat.

3 PREPARASI SAMPEL

Keberhasilan analisis kualitatif maupun kuantitatif dalam Analisis Farmasi tergantung dari keberhasilan mengurangi interferensi senyawa lain dan matriks dalam analisis terhadap zat aktif atau analit yang akan ditentukan

Tahapan dalam melakukan analisis terdiri atas: penentuan masalah analisis, pemilihan metode, pengambilan sampel, penyiapan sampel untuk analisis, perlakuan pemisahan analisis, pengukuran, perhitungan dan pelaporan (Christian, 2004).

Proses penentuan analisis dimulai dengan menentukan tujuan analisis, yaitu kualitatif atau kuantitatif. Selanjutnya, penentuan kegunaan dari hasil analisis yang diperoleh, pengguna hasil analisis yang akan dilakukan, batas waktu untuk penggunaan hasil analisis. Tingkat akurasi dan presisi hasil analisis yang diinginkan juga harus ditentukan dalam tahap ini. Perhitungan alokasi anggaran untuk pereaksi, pemeliharaan alat dan personil yang mengerjakan. Penanganan dan pengambilan sampel juga harus ditentukan untuk pengiriman oleh yang menugaskan analisis atau harus diambil oleh yang melaksanakan analisis (Christian, 2004).

Jenis dan ukuran sampel yang diterima menentukan pemilihan metode yang akan dipilih. Selain itu, preparasi sampel perlu dipilih berdasarkan sifat fisikokimia dan kadar senyawa aktif yang akan ditentukan. Bentuk sampel murni atau campuran menentukan selektivitas metode yang akan dipilih demikian juga dengan akurasi dan presisi hasil analisis yang diinginkan. Metode yang dipilih juga harus melihat peralatan atau instrumen yang tersedia di laboratorium pengujian. Demikian juga dengan kompetensi laboran yang tersedia harus sudah terlatih dan berpengalaman. Metode yang dipilih dapat diperoleh dari metode standar atau literatur. Jika tidak ada metode standar dan dalam literatur, berarti perlu dikembangkan metode yang baru. Bahan pembanding perlu disediakan jika digunakan metode analisis instrumen seperti spektrofotometri atau kromatografi.

Proses pengambilan sampel harus memperhatikan jenis dan ukuran, homogenitas, stabilitas, pengambilan dilakukan sendiri atau sudah tersedia.

Metode preparasi sampel perlu ditentukan dengan mempertimbangkan wujud sampel (padat, cair, atau gas), kelarutan analit dalam berbagai pelarut,

volatilitas analit, pengaruh matriks, kadar analit, perubahan bentuk analit untuk pengukuran (derivatisasi), dan pengaturan kondisi pengukuran.

Beberapa contoh perlakuan pemisahan analisis antara lain distilasi, pengendapan atau pengendapan berfraksi, ekstraksi pelarut, *Solid Phase Extraction* (SPE), *Solid Phase Micro Extraction* (SPME), kromatografi, elektroforesis, dialisis, dan bentuk pemisahan lainnya.

Tahap pengukuran perlu dilakukan dengan pengecekan kalibrasi instrumen, kualifikasi instrumen, penggunaan blanko dan kontrol, penggunaan bahan baku pembanding, replikasi pengukuran, analisis yang mumpuni, kebersihan, dan perawatan alat yang baik.

Perhitungan dan pelaporan sebagai tahap akhir perlu memperhitungkan pemindahan data yang akurat, reliabilitas perhitungan dengan penggunaan statistika atau komputasi dan tata cara pelaporan.

Preparasi sampel adalah proses yang dilakukan untuk memisahkan analit dengan senyawa lainnya sehingga menghindari adanya positif palsu ataupun negatif palsu. Setelah mengetahui senyawa yang ada dalam bahan, analisis sering dilanjutkan dengan berapa banyak dalam sampel yang dimaksud (Watson, 2005).

Penggolongan jumlah analit dalam sampel dikategorisasikan sebagai major jika berjumlah $>1\%$, minor di antara $0,1\% - 1\%$, *trace* jika $<0,1\%$ dan *ultra trace* dalam skala bagian per juta (bpj). Bahan yang sedang atau akan dianalisis disebut sebagai analit dan merupakan bagian dari sampel. Bahan lain yang terdapat dalam sampel yang bukan analit disebut matriks.

Bahan dapat berwujud padat, cair ataupun gas. Bahan yang akan dianalisis disebut juga sebagai sampel uji. Bahan berada dalam keadaan murni jika jumlahnya sekitar 100% , tetapi dapat juga berada dalam keadaan campuran dengan bahan yang lainnya. Untuk sampel gas, dapat dilakukan pelarutan dan penyerapan ke dalam pelarut untuk menangkap analit yang terlarut dalam gas (Vogel, 1989).

Sampel berupa cairan dapat dianalisis secara langsung atau dengan melakukan pengenceran terlebih dahulu. Untuk sampel berupa suspensi dapat dilakukan pengenceran, ekstraksi cair-cair atau proses lain seperti

oksidasi, reduksi, pembentukan kompleks, dekomposisi dan destruksi (Watson, 2005).

Sampel berbentuk padat dapat dilakukan pelarutan sebelumnya, filtrasi, ekstraksi analit, destruksi dan digesti. Untuk sampel campuran dapat digunakan metode-metode untuk meningkatkan selektivitas antara lain pemisahan analitik (ekstraksi, destilasi, kromatografi), reaksi kimia khusus (pengendapan selektif, oksidasi/reduksi, masking-demasking, pengaturan pH) dan pengubahan kondisi titrasi (reaksi titrasi, lingkungan/medium titrasi dan metode penunjukan titik akhir) (Watson, 2005, Skoog, 2017).

Adapun eksistensi analit dalam sampel dapat sebagai senyawa tunggal (aktif maupun non-aktif), multikomponen (campuran > 2 senyawa aktif/analit) dan dalam sampel biologi (sebagai senyawa utuh, metabolit atau senyawa terikat)

Matriks sampel adalah bagian dari sampel di luar analit yang tidak perlu dianalisis, tapi dapat mengganggu analisis terutama dalam sampel multikomponen, campuran atau sampel biologi. Jenis matriks dapat berupa bahan anorganik, bahan organik, cairan/jaringan biologi (darah, plasma, daging, urin). Sifat matriks diharapkan dapat *inert* dan tidak mengganggu analisis. Namun, matriks dapat mengganggu analisis karena turut terukur dan teranalisis serta merusak dan mengkontaminasi instrumen ukur.

Tujuan preparasi sampel adalah untuk pemekatan analit, meningkatkan keterukuran analit, menghilangkan komponen pengganggu analisis dan melindungi instrumen ukur dari kerusakan dan kontaminasi.

Klasifikasi teknik pengukuran berdasarkan bentuk sampel yang diukur (Watson, 2005; Skoog, dkk., 2017):

1. Teknik analisis yang memerlukan sampel berupa larutan: Volumetri, Spektrofotometri, Spektrofluorometri, Spektrometri Serapan Atom, Emisi plasma, Kromatografi (Kromatografi Kertas, Kromatografi Lapis Tipis, Kromatografi Cair Kinerja Tinggi), Elektrokimia (Potensiometri, Polarografi, Amperometry), dan Elektroforesis.
2. Teknik analisis yang memerlukan sampel padat ataupun cairan: Analisis Fluoresensi Sinar X, Analisis Aktivasi Neutron dan Spektrometri Infra Merah.

3. Teknik analisis yang memerlukan sampel padat: *DC Arc Emission Spectroscopy*, *AC Arc Emission Spectroscopy*, *Microprobe technique*, *Combustion techniques*.

Perlakuan awal untuk sampel cair antara lain ekstraksi cair-cair (ECC), ekstraksi fase padat (SPE), pemisahan dengan membran, distilasi (untuk beberapa sampel), dan liofilisasi (untuk sampel biologi). Perlakuan awal untuk sampel antara lain pengurangan atau pengecilan ukuran sampel, pengeringan dan pencetakan, pelarutan dalam pelarut yang sesuai dan ekstraksi dan derivatisasi, yaitu pembentukan senyawa derivat yang dapat terukur oleh instrumen atau terdeteksi oleh detektor.

Jenis pemisahan terdiri atas pemisahan preparatif dan pemisahan analitik. Pemisahan preparatif bertujuan untuk memperoleh produk yang berharga dari suatu campuran dengan cara menghilangkan kontaminan sekecil-kecilnya yang dapat dilakukan dengan skala besar, skala kecil dan skala sangat kecil. Teknik pemisahan yang paling banyak digunakan adalah ekstraksi, distilasi berfraksi, kromatografi preparatif, kristalisasi dan lain-lain.

Sementara, untuk pemisahan analitik ditujukan untuk memperoleh informasi analitik yang bermutu (akurat, presisi, selektif, dan sensitif) yang dihasilkan melalui suatu pengukuran dari hasil pemisahan. Skala pemisahan meliputi: makro, semimikro, mikro, nano tergantung pada kadar analit yang diperoleh dan teknik analisis yang digunakan.

Metode terkini yang banyak dikembangkan untuk preparasi sampel pemisahan analitik antara lain *solid phase extraction* (SPE), *solid phase micro extraction* (SPME) dan *Molecularly Imprinted Polymer* (MIP).

4 POLIMER TERCETAK MOLEKUL: PREDIKSI KOMPUTASI DAN SINTESIS

Polimer Tercetak Molekul atau *Molecularly Imprinted Molecule* (MIP) merupakan salah satu metode pemisahan untuk memisahkan analit dari matriks dengan selektivitas yang lebih tinggi. (Cheong, dkk., 2012; Chen, dkk., 2016). MIP jika dianalogikan seperti reseptor sintetik yang dimaksudkan untuk mengikat molekul dengan prinsip ikatan antibodi-antigen (BelBruno, 2019). Pustaka lain menyebutkan bahwa MIP adalah bahan yang dirancang dan dapat dijelaskan dalam analogi "model gembok dan kunci" yang digambarkan oleh Emil Fischer lebih dari satu abad yang lalu (Maier, 2015).

Beberapa keunggulan MIP adalah (Chen dkk., 2011; Baker, 2022):

1. Struktur obat yang dapat ditentukan sebelumnya.
2. Pengenalan yang spesifik terhadap molekul target.
3. Proses pembuatan yang sederhana dan mudah.
4. Selektivitas yang telah ditentukan baik tunggal maupun campuran.
5. Ketahanan dalam pelarut organik, pereaksi asam atau basa, dan suhu tinggi.
6. Aplikasi yang luas dalam berbagai bidang.

Proses pencetakan molekul (*molecular imprinting technology*) meninggalkan suatu rongga yang dapat mengikuti struktur dari analit yang diinginkan dengan kopolimerisasi target, monomer fungsional dan pengikat silang (*crosslinker*). Molekul cetakan yang terbentuk kemudian dilepaskan sehingga terbentuk rongga kosong yang bertindak sebagai cetakan dapat dengan mudah berinteraksi dengan molekul target dengan mekanisme pengenalan gugus fungsi dan bentuk. Proses sintesis MIP tidak hanya dapat digunakan untuk satu molekul cetakan, tetapi dapat diaplikasikan untuk pemisahan beberapa senyawa secara simultan sehingga meningkatkan selektivitas pemisahan lebih dari satu senyawa. Selain MIP juga dibuat *Non Imprinted Polymer* (NIP) untuk dibandingkan (Pichon, dkk., 2020; Arabi, dkk., 2020).

4.1 Sintesis dan Proses Pembuatan Polimer Tercetak Molekul

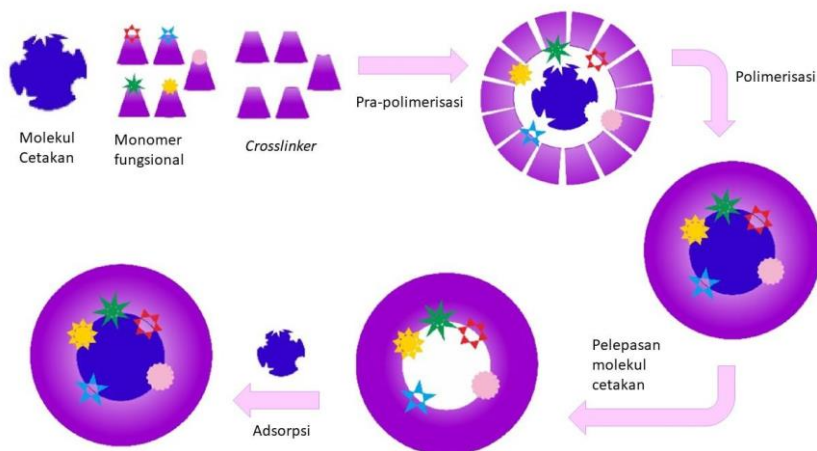
Sintesis MIP umumnya dilakukan dengan dua metode, yaitu ruah dan presipitasi. Polimerisasi ruah sering menjadi pilihan karena prosesnya yang sederhana dan pelarut yang digunakan tidak berlebihan. Metode lain untuk

polimerisasi adalah penggunaan gelombang mikro menggunakan *microwave* untuk polimerisasi (Das, dkk., 2020; Fahim dan Magd, 2021). Sebaliknya, metode presipitasi menghasilkan polimer yang homogen dan berukuran partikel yang kecil pada skala mikrometer dan nanometer dengan penggunaan pelarut yang lebih banyak (Jouyban, Farajzadeh, Afshar Mogaddam, dkk., 2021; Pardeshi dan Singh, 2016; Ruiz-Córdova, dkk., 2021).

Proses pembuatan MIP diawali dengan proses polimerisasi, pelepasan molekul cetakan, karakterisasi MIP, dan pengikatan kembali analit kepada cetakan dengan aplikasi pada sampel.

Penggunaan metode komputasi atau uji *in silico* pada pengembangan MIP dilakukan untuk pemilihan monomer fungsional dan pelarut terbaik dengan memprediksi interaksi yang terjadi antar komponen MIP. Interaksi antara molekul cetakan dengan monomer fungsional terbaik dilihat dari nilai energi ikatan yang terbentuk. Penggunaan metode komputasi yang lebih *advance*, yaitu dinamika molekuler dilakukan untuk memastikan interaksi yang dihasilkan dapat bertahan dalam jangka waktu tertentu (Silva, dkk., 2022).

Interaksi kovalen dan nonkovalen dapat terjadi dari pembuatan MIP. MIP yang memiliki ikatan kovalen akan berinteraksi dengan gugus fungsi tertentu yang dimiliki oleh molekul cetakan, sementara pada metode nonkovalen dihasilkan MIP dengan ikatan hidrogen, interaksi dipol-dipol, interaksi elektrostatik, ikatan van der Waals (Lorenzo, dkk., 2013; Hashim dkk., 2014; dan Lofgreen dkk., 2014).



Gambar 4.1 Gambar Tahapan sintesis polimer tercetak molekul. (Astuti, 2024)

Tahapan persiapan MIP terdiri atas:

- Polimerisasi (molekul cetakan berinteraksi dengan monomer fungsional, menggunakan pengikat silang dan pelarut porogen).
- Pengukuran kinerja (MIP dan Non MIP).
- Karakterisasi (menggunakan metode instrumen).
- Pelepasan molekul cetakan (kondisi ekstraksi yang khusus untuk memutuskan ikatan molekul cetakan dari MIP).
- Pengikatan ulang molekul cetakan (proses adsorpsi yang mengikuti model Langmuir, Freundlich, dan Scatchard).

4.2 Faktor Penentu Keberhasilan Sintesis Polimer Tercetak Molekul

Keberhasilan dalam proses sintesis MIP ditentukan langkah awal, yaitu (Chen, dkk., 2011; Li, dkk., 2014; Yan, dkk., 2006; Holland, dkk., 2010):

- Menentukan molekul cetakan.
Molekul cetakan merupakan senyawa aktif yang akan dianalisis. Molekul berinteraksi dengan monomer, umumnya molekul cetakan merupakan senyawa target yang ingin dipisahkan atau dianalisis pada sampel yaitu senyawa organik (larut maupun tidak larut air), senyawa anorganik, ion logam, dan senyawa besar seperti protein.
- Memilih monomer fungsional
Monomer fungsional akan membentuk interaksi dengan molekul cetakan yang kuat untuk menghasilkan selektivitas yang baik.
- Inisiator
Senyawa kimia turunan azo seperti azobisisobutironitril (AIBN) adalah contoh inisiator untuk mengawali polimerisasi.
- Pengikat Silang
Pengikat silang berfungsi menstabilkan dan mempertahankan posisi monomer fungsional pada tempat pengikatan yang sama untuk pengenalan molekul cetakan selanjutnya.
- Pelarut Porogen
Pelarut media pendispersi dan membentuk pori dalam polimerisasi. Pelarut yang digunakan umumnya adalah asetonitril, dikloroetana, kloroform, N,N-dimetilformamida (DMF), dan toluena.

5 PENELITIAN POLIMER TERCETAK MOLEKUL

5.1 Pengembangan dan Karakterisasi Polimer Tercetak Molekul dan Nanokomposit Tercetak Molekul sebagai Kandidat Sorben Selektif untuk Analisis Sofosbuvir dalam Plasma Dara

(Hilda Aprilia Wisnuwardhani, Rino R. Mukti, Slamet Ibrahim, Sophi Damayanti)

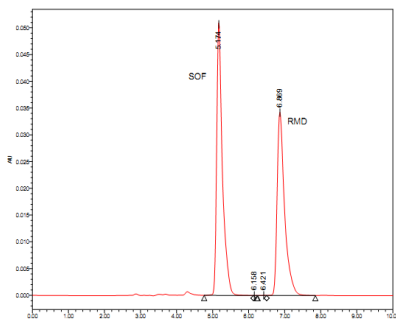
Latar belakang penelitian bertitik tolak dari penggunaan obat antivirus pada masa pandemi. Penggunaan kembali obat-obat tersebut perlu terus dievaluasi yang dilakukan dengan cara pemantauan efek terapeutik dengan metode bioanalisis. Senyawa antivirus yang digunakan sebagai obat adalah remdesivir (RMD) dan sofosbuvir (SOF). Kedua obat tersebut termasuk obat yang dijadikan sebagai kandidat obat pada pengobatan COVID-19 melalui serangkaian pengujian.

Pada penelitian yang dilakukan telah dibuat MIP non komposit dan komposit. Metode ruah dan presipitasi MIP digunakan untuk pembuatan non komposit. MIP non komposit yang terbentuk kemudian digunakan pada pemisahan SOF dari plasma darah dengan metode Kromatografi Cair Kinerja Tinggi (KCKT). Sedangkan untuk MIP komposit dibuat dengan metode presipitasi dengan variasi penambahan nanopartikel perak (AgNPs). Perbandingan kemampuan kapasitas adsorpsi antara kedua MIP tersebut kemudian dianalisis.

Tujuan penelitiannya adalah membuat MIP dan komposit Ag@MIP dengan menggunakan cetakan SOF, yang dapat digunakan untuk pemisahan senyawa dari matriks biologi. melakukan karakterisasi dan evaluasi MIP dan komposit Ag@MIP tercetak molekul SOF dan menguji sampel plasma darah yang mengandung SOF (sampel *spike placebo*), dan menggunakan MIP polimer tercetak SOF sebagai sorben untuk preparasi sampel.

Pengembangan dan validasi metode analisis dilakukan dengan metode spektrofotometri UV/Vis dan metode KCKT untuk memperluas penerapan sesuai kelengkapan instrumen di laboratorium. Analisis kapasitas adsorpsi polimer ditentukan dengan metode spektrofotometri UV/Vis. Analisis adsorpsi selektivitas dan kapasitas adsorpsi ditentukan dengan metode KCKT. Metode analisis spektrofotometri UV/Vis penetapan kadar SOF memenuhi kriteria akurasi, presisi dan linieritas. Hasil menunjukkan bahwa metode

KCKT juga memenuhi syarat untuk kriteria akurasi, presisi dan linieritas. Gambar 6.1 menunjukkan kromatogram SOF dan RMD dengan resolusi puncak yang telah memenuhi syarat.



Gambar 5.1 Kromatogram larutan standar SOF dan RMD

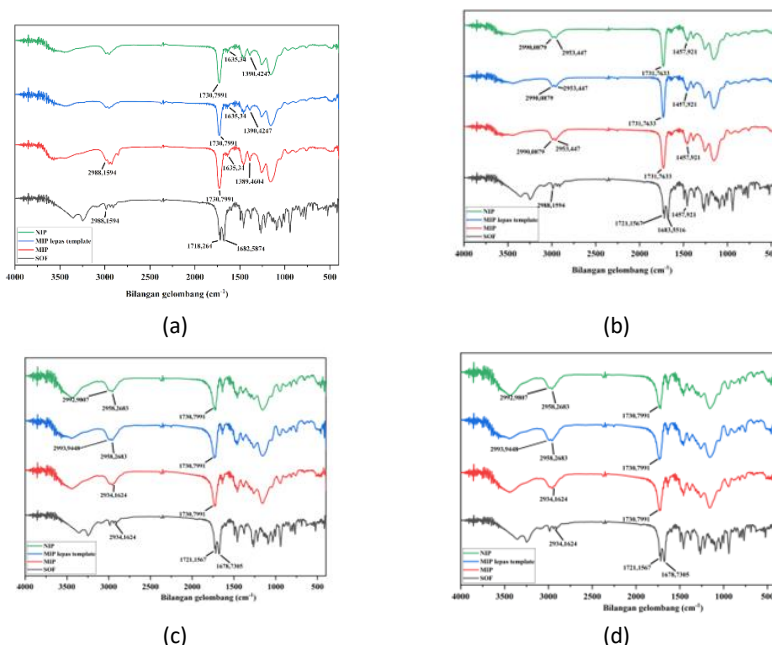
Hasil pengujian *in silico* berupa energi bebas ikatan (ΔE) dan energi bebas Gibbs (ΔG) dari kompleks prepolimerisasi antara SOF dengan beberapa monomer fungsional yang digunakan. Monomer fungsional yang paling baik berinteraksi dengan cetakan SOF adalah MAA. Hal ini dapat dilihat dari nilai ΔE dan ΔG yang paling negatif. Nilai yang paling negatif dari kedua parameter tersebut menunjukkan bahwa interaksi antara monomer fungsional (MAA) dan molekul cetakan (SOF) akan berlangsung spontan dan akan menunjukkan selektivitas yang tinggi.

Berdasarkan hasil energi ikatan beberapa kompleks SOF dengan monomer fungsional, maka pelarut porogen yang paling baik adalah kloroform, dengan nilai ΔE sebesar -9.38397 kkal/mol. Namun, dengan mempertimbangkan aspek *green chemistry* dan salah satu metode polimerisasi yang dipilih adalah metode presipitasi, maka pelarut yang dipilih adalah asetonitril. Hal ini diperkuat dengan nilai energi ikatan yang juga bernilai negatif untuk pelarut asetonitril pada semua kompleks SOF-MAA (Pardeshi and Singh, 2016; Piletsky, 2006).

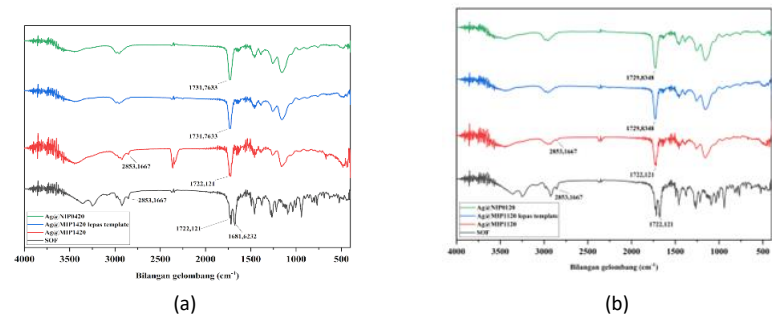
Hasil pengujian komputasi dengan metode *Density functional theory* (DFT), dilanjutkan ke pengujian dinamika molekuler. Hasil simulasi DFT menunjukkan bahwa kompleks polimer dengan perbandingan 1:4 mempunyai nilai energi ikatan lebih negatif dibandingkan perbandingan 1:1. Simulasi interaksi antara MAA dan SOF sebagai monomer dan molekul cetakan dalam berbagai perbandingan 1:1 hingga 1:4, dilakukan selama 200 ns. Hasil simulasi dinamika molekuler mendukung hasil analisis Job Plot,

yaitu kompleks 1:1 mempunyai hasil RDF yang lebih baik dibandingkan dengan kompleks lainnya. Oleh karena itu, polimer akan dibuat menggunakan kedua rasio stoikiometri ini untuk dibandingkan yang memberikan kinerja lebih baik.

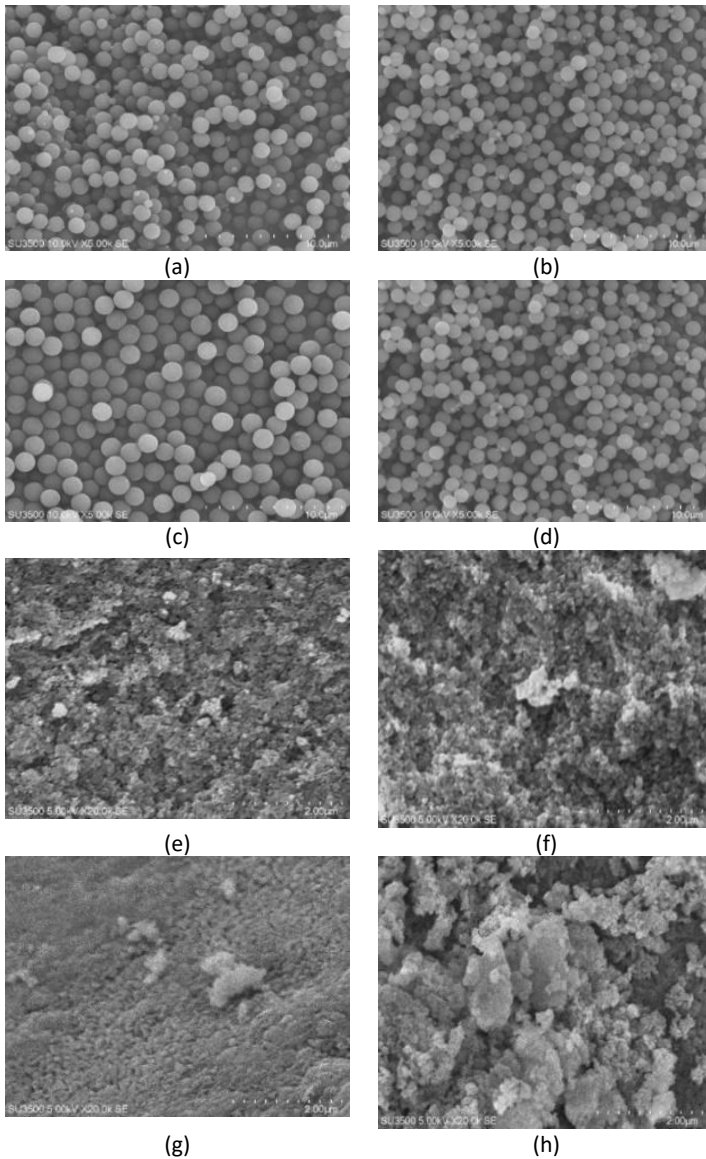
Pada penelitian ini juga disintesis MIP dengan tambahan nanopartikel perak (AgNPs). Polimer ini disebut dengan istilah Ag@MIP. Setelah dilakukan sintesis dilakukan karakterisasi dengan menggunakan IR, SEM, TG, XRD dan EDS sesuai gambar-gambar di bawah ini.



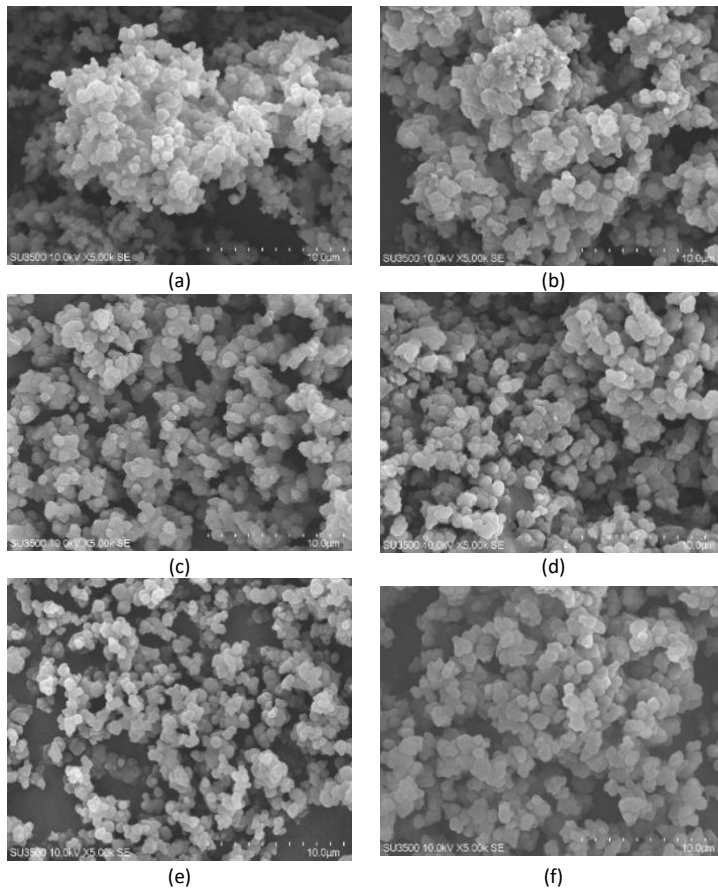
Gambar 5.2 Spektrum FTIR MIP A, NIP A (a) dan MIP B, NIP B (b) disintesis dengan metode presipitasi; MIP C, NIP C (c) dan MIP D, NIP D (d) disintesis dengan metode ruah



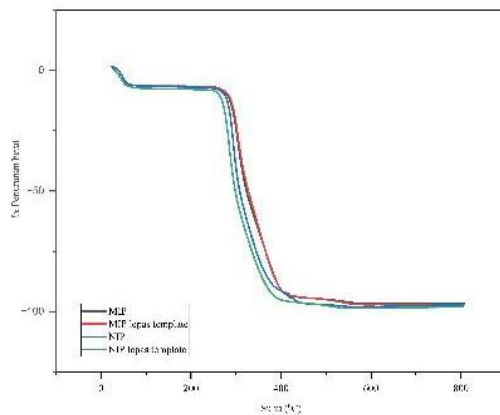
Gambar 5.3 Spektrum FTIR Ag@MIP1420 dan Ag@NIP0420 (a); Ag@MIP1120 dan Ag@NIP0120 (b) disintesis dengan metode presipitasi



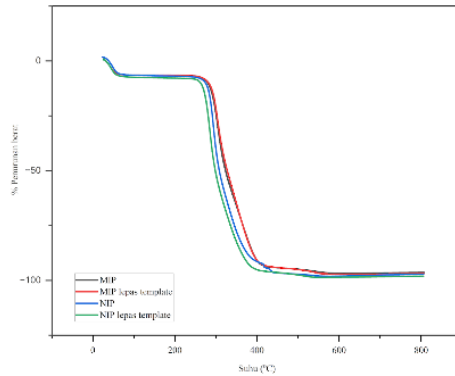
Gambar 5.4 Hasil pengujian SEM untuk mikroskopis MIP A, B (a, c) and NIP A, B (b, d) dengan metode presipitasi; perbesaran 5.00k; MIP C, D (e, g) and NIP C, D (f, h) dengan metode ruah; perbesaran 20.0k



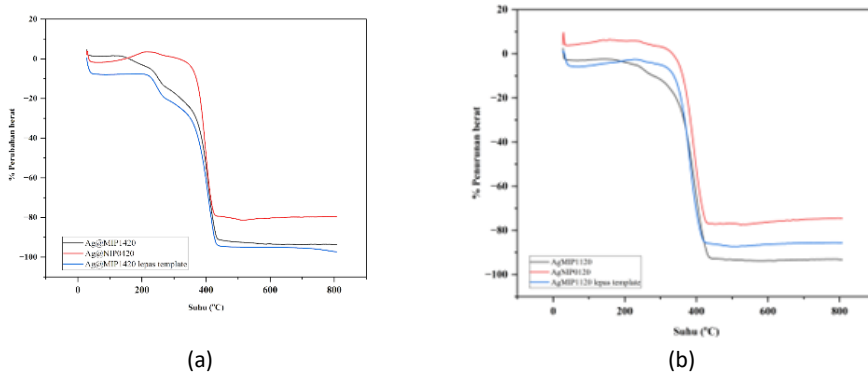
Gambar 5.5 Hasil pengujian SEM untuk mikroskopis Ag@MIP 1420 (a, e), Ag@MIP 1120 (b, d), Ag@NIP0420 (c), dan Ag@NIP0120 (d) dengan metode presipitasi; perbesaran 5.00k



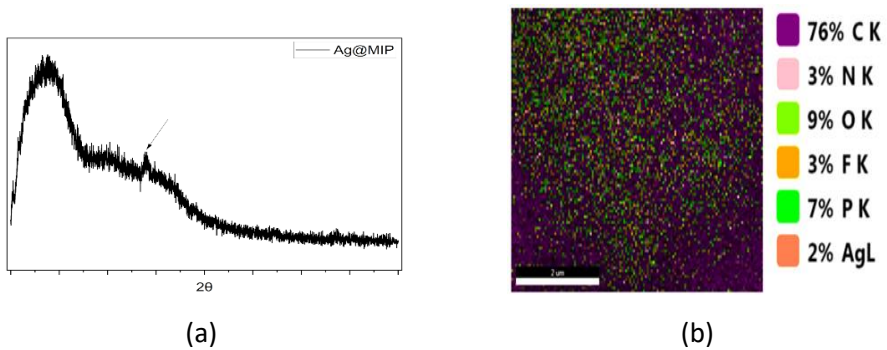
Gambar 5.6 Hasil karakterisasi TG untuk polimer yang disintesis dengan metode ruah



Gambar 5.7 Hasil karakterisasi TG untuk polimer yang disintesis dengan metode presipitasi



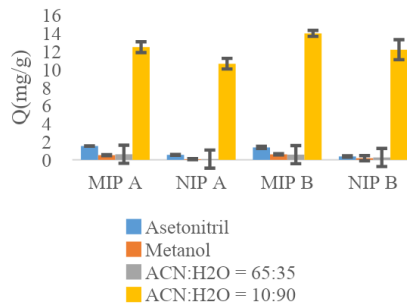
Gambar 5.8 Kurva TG untuk Ag@MIP1420 dan Ag@MIP1120



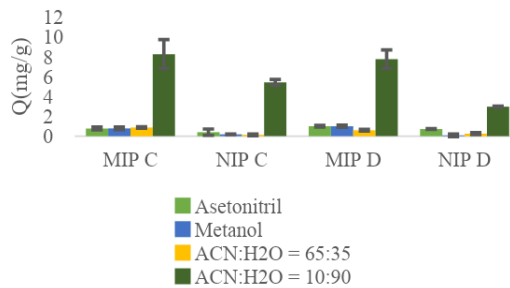
Gambar 5.9 Hasil karakterisasi Ag@MIP dengan (a) XRD; (b) EDS mapping

Pengujian kemampuan adsorpsi dilakukan untuk menentukan pelarut yang paling baik untuk kondisi adsorpsi analit terhadap MIP yang dihasilkan. Hal ini dilakukan untuk menentukan keberhasilan pembentukan celah molekul cetakan pada permukaan polimer yang dinyatakan dengan faktor *imprinting* (IF). Berdasarkan uji kemampuan adsorpsi, hasil uji (menunjukkan

polimer metode polimerisasi presipitasi memiliki kemampuan adsorpsi lebih baik dibandingkan polimerisasi ruah.



Gambar 5.10 Kemampuan adsorpsi MIP A, NIP A dan MIP B and NIP B (n=3)



Gambar 5.11 Kemampuan adsorpsi of MIP C, NIP C dan MIP D and NIP D (n=3)

Berdasarkan uji statistik *t-student*, tidak terdapat perbedaan yang signifikan antara nilai kapasitas adsorpsi untuk polimer tercetak molekul SOF (MIP A dan MIP B), jika dibandingkan dengan komposit tercetak molekul (Ag@MIP1420 dan Ag@MIP1120). Berdasarkan hasil pengujian luas permukaan dengan karakterisasi BET, nilai luas permukaan polimer tercetak molekul MIP A dan MIP B jauh lebih besar dibandingkan komposit tercetak molekul Ag@MIP1420 dan Ag@MIP 1120.

Tahap akhir dilakukan Aplikasi MIP dan NIP sebagai sorben pada pemisahan SOF dari plasma darah *spike* dan hasil *reusability* penggunaan kedua. Hasil perolehan kembali kadar SOF yang dideteksi dengan metode KCKT. Hasil menunjukkan bahwa polimer MIP A, MIP B, MIP C, dan MIP D memiliki nilai persen perolehan kembali yang memenuhi persyaratan metode bioanalisis yaitu pada rentang 80-120 %.

Tabel 5.1 Hasil pengujian adsorpsi BET untuk polimer MIP dan Ag@MIP bercetakan SOF.

Polimer	Luas Permukaan (m ² /g)
MIP A	162
NIP A	64
MIP B	100
NIP B	17
MIP C	1
NIP C	4
MIP D	0.39
NIP D	7
Ag@MIP1420	9
Ag@NIP0420	8
Ag@MIP1120	9
Ag@NIP0120	8

Kesimpulan atau Kontribusi Ilmiah dari penelitian ini adalah:

1. Berdasarkan uji DFT, MAA merupakan monomer fungsional yang paling baik berinteraksi dengan SOF. Penentuan konstanta asosiasi menunjukkan bahwa asetonitril merupakan pelarut terbaik untuk sintesis. Nilai energi ikatan asetonitril sebesar -9,38397 kkal mol⁻¹ mendukung hasil tersebut. Berdasarkan simulasi dinamika molekuler, rasio kompleks 1:1 memberikan hasil yang baik dari parameter RDF, dan didukung oleh hasil analisis Jobs plot.
2. Polimer yang disintesis dengan metode polimerisasi presipitasi (MIP A dan MIP B) memberikan hasil karakterisasi morfologi yang lebih homogen. Hal ini dibuktikan dengan uji kemampuan adsorpsi, yaitu nilai kapasitas adsorpsi MIP A dan MIP B lebih baik dibandingkan dengan MIP C dan D. Ag@MIP memiliki morfologi yang lebih tidak teratur dibandingkan MIP A dan MIP B walaupun disintesis dengan metode yang sama.
3. MIP dan Ag@MIP mengikuti kinetika adsorpsi model orde dua semu dan model adsorpsi isoterm Langmuir. Berdasarkan hasil adsorpsi BET diketahui MIP A dan B memiliki luas permukaan lebih tinggi dibandingkan MIP C dan D. Hal ini dapat dibuktikan dari nilai kapasitas adsorpsi MIP A dan B yang lebih tinggi dibandingkan MIP C dan D.
4. MIP A, MIP B, MIP C, MIP D memiliki selektivitas yang lebih tinggi terhadap SOF dibandingkan RMD. MIP A, MIP B, MIP C, MIP D dan mampu bertindak sebagai sorben pada dEFP dan mampu memisahkan SOF dari matriks plasma darah. Berdasarkan karakterisasi performa polimer tercetak molekul yang dibuat, MIP B memiliki kemampuan mengekstraksi SOF yang paling baik dibandingkan polimer tercetak molekul yang lainnya.

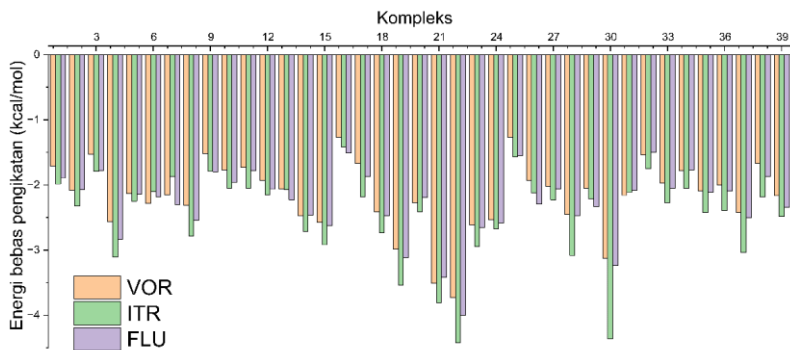
5.2 Sintesis, Karakterisasi, dan Aplikasi Polimer Tercetak Molekul untuk Ekstraksi Beberapa Antijamur Triazol dalam Plasma Darah

(Untung Gunawan, Atthar Luqman Ivansyah Slamet Ibrahim, Sophi Damayanti)

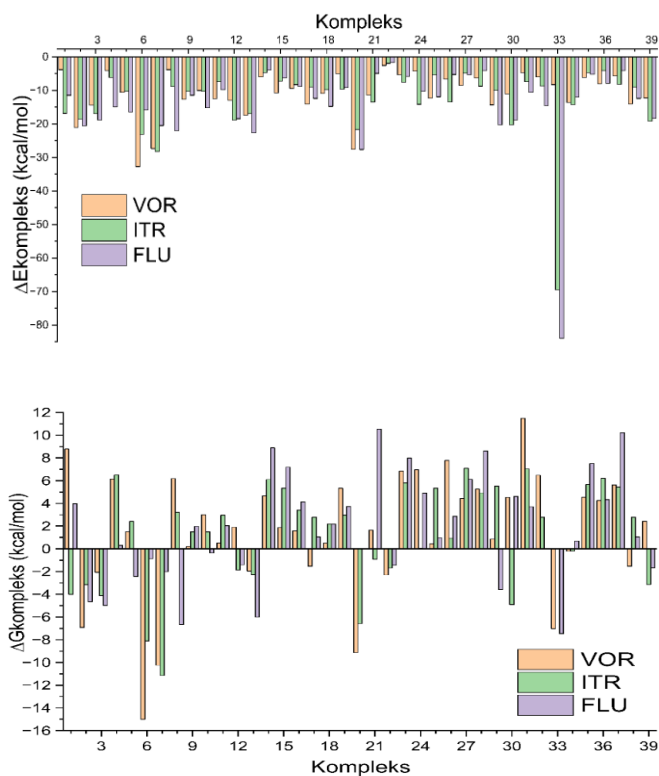
Pengembangan MIP pada penelitian ini didasari pada koinfeksi jamur merupakan salah satu masalah yang muncul pada pasien yang terinfeksi COVID-19, patogen yang paling umum menyebabkan koinfeksi jamur pada pasien COVID-19 adalah *Aspergillus sp* dan *Candida sp* (Song, dkk., 2020; Talento and Hoenigl, 2020). Berbagai metode analisis telah dikembangkan untuk penetapan kadar antijamur golongan triazol secara simultan dalam matriks biologis, metode yang paling umum adalah Kromatografi Cair Kinerja Tinggi (KCKT) dan *Ultra Performance Liquid Chromatography* (UPLC).

Tujuan penelitian, yaitu melakukan metode komputasi untuk menentukan komponen terbaik dalam sintesis MIP, melakukan sintesis, karakterisasi, dan evaluasi MIP untuk pemisahan antijamur golongan triazol secara simultan, melakukan pengembangan metode analisis antijamur golongan triazol secara simultan, dan melakukan pengujian terhadap MIP sebagai sorben ekstraksi fasa padat untuk pemisahan dan pengayaan antijamur triazol secara simultan dalam plasma darah.

Penerapan metode komputasi menjadi salah satu kunci dalam penelitian ini. Interaksi vorikonazol (VOR), itrakonazol (ITR), dan flukonazol (FLU) sebagai molekul cetakan dan monomer fungsional sebagai interaksi *host-guest* dianalisis dan digunakan sebagai panduan skrining untuk sintesis di laboratorium. Pendekatan komputasi melibatkan interaksi antarmolekul, molekul cetakan bertindak sebagai *host*, dan 39 monomer fungsional yang umum digunakan dalam sintesis MIP sebagai molekul *guest*. Simulasi komputasi dilakukan dengan menggunakan dua metode berbeda. Metode yang digunakan untuk pemilihan monomer fungsional dengan menggunakan metode Hartree-Fock (HF) 3-21G dan teori kerapatan fungsi (DFT) B3LYP/6-311G++(d,p). Simulasi penambatan molekul menggunakan perangkat lunak Yasara (Krieger and Vriend, 2014) digunakan untuk membuat koordinat awal senyawa kompleks antara struktur molekul cetakan dan 39 monomer fungsional yang umum digunakan dalam sintesis MIP, termasuk monomer yang bersifat asam, netral, dan basa (Boukadida, dkk., 2022).



Gambar 5.12 Hasil energi bebas pengikatan kompleks dari simulasi penambatan molekul



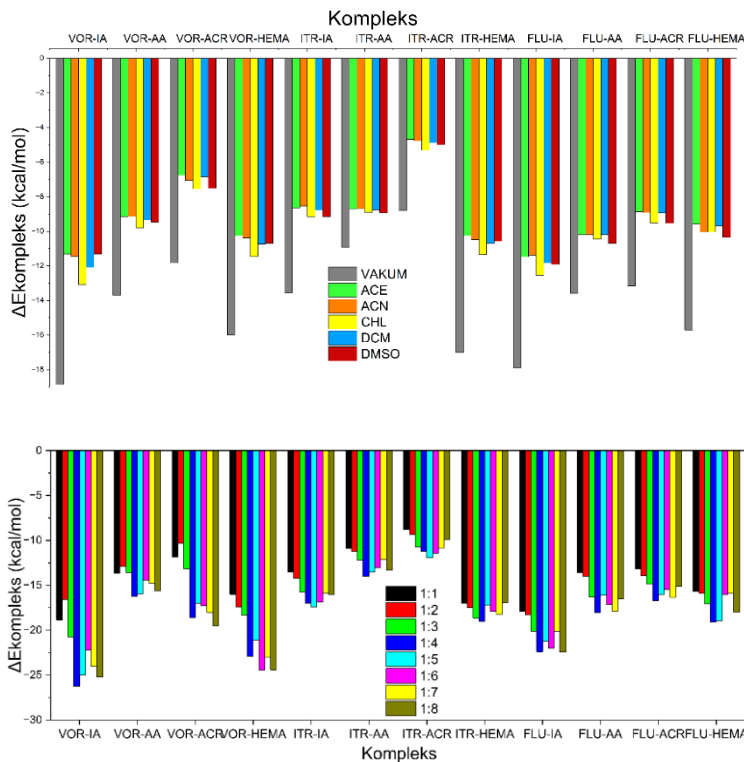
Gambar 5.13 Energi kompleksasi dan energi bebas Gibbs kompleks

Asam akrilat (AA), asam itakonat (IA), akrilamida (ACR), 2-hidroksietil metakrilat (HEMA) dipilih sebagai kandidat monomer berdasarkan parameter energi bebas pengikatan dari penambatan molekul, pembentukan ikatan

hidrogen antara molekul cetakan dan monomer fungsional, nilai $\Delta E_{\text{kompleks}}$, dan nilai $\Delta G_{\text{kompleks}}$.

Selanjutnya, optimasi dilakukan dari molekul cetakan dan 4 monomer fungsional menggunakan metode DFT. Prosedur yang sama dengan metode HF diterapkan pada penambatan molekul. Hasil simulasi menunjukkan penurunan nilai $\Delta E_{\text{kompleks}}$ dengan rasio optimal untuk pembentukan kompleks adalah 1:4.

Berdasarkan perhitungan parameter *Frontier Molecular Orbital* (FMO), pelarut optimal untuk pembentukan kompleks antara molekul cetakan antijamur triazol dan monomer fungsional terpilih adalah asetonitril.



Gambar 5.14 Energi kompleksasi dalam kondisi vakum dan terlarut (atas) dan pengaruh konsentrasi monomer terhadap energi kompleksasi (bawah)

Kekuatan interaksi antara molekul cetakan dan monomer yang terpilih dilakukan dengan penentuan Konstanta Asosiasi (K_a) menggunakan metode spektrofotometri UV. Pengukuran absorbansi pada setiap monomer yang ditambahkan, dan konstanta asosiasi dihitung menggunakan persamaan

Benesi-Hildebrand dengan memplot grafik $1/[\text{monomer}]$ terhadap $1/\Delta A$. Hasil pengujian menunjukkan nilai K_a yang diperoleh lebih dari 100 M^{-1} yang menunjukkan interaksi antara molekul cetakan dengan monomer terpilih kuat. Nilai K_a monomer asam akrilat yang lebih tinggi dibandingkan monomer lainnya menunjukkan kekuatan ikatan yang lebih tinggi pada interaksi antara asam akrilat dengan molekul cetakan. Analisis Job plot dilakukan untuk mengetahui stoikiometri reaksi antara molekul cetakan dan monomer fungsional pada kompleks pra-polimerisasi. Nilai rasio molar bervariasi antara 0,434 (minimal) sampai dengan 0,551 (maksimal). Hal ini menunjukkan bahwa struktur kompleks yang dominan dalam kondisi kesetimbangan adalah 1:1 yang terbentuk antara molekul cetakan dan monomer fungsional.

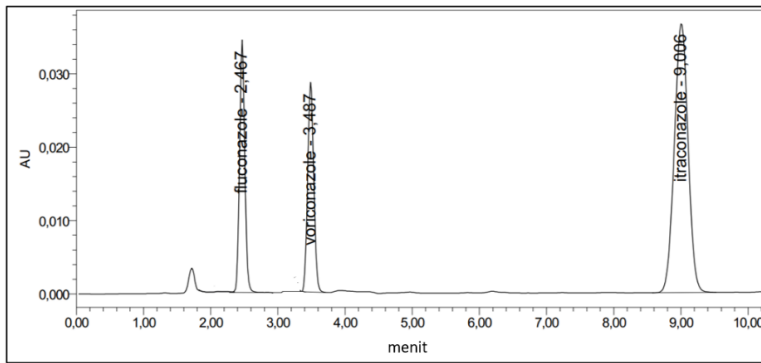
Sintesis MIP dan NIP dilakukan menggunakan metode polimerisasi presipitasi dan polimerisasi ruah. Tiga rasio molekul cetakan:monomer fungsional:pengikat silang yang berbeda (1:1:20, 1:4:20, dan 1:8:20) digunakan untuk optimasi sintesis.

Optimasi dilakukan untuk mendapatkan polimer dengan rendemen tertinggi, faktor yang dioptimasi antara lain: pemilihan monomer, pelarut porogen, konsentrasi inisiator, suhu, dan waktu sintesis.

Tabel 5.2 Kondisi sintesis optimal

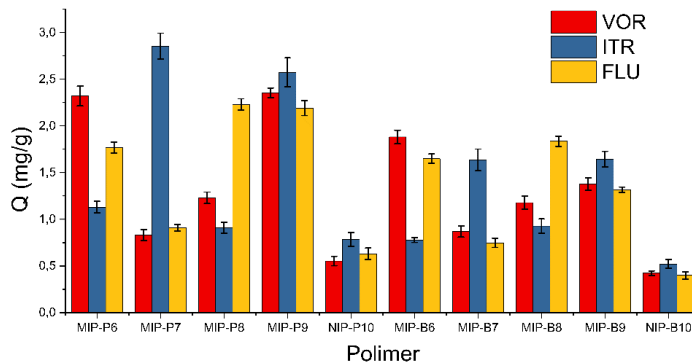
Molekul cetakan	Antijamur triazol (ST-MIP dan MT-MIP)
Monomer fungsional	AA
Pengikat silang	EGDMA
Rasio molar cetakan:monomer:pengikat silang	1:4:20, 1:1:20, 1:8:20
Inisiator	AIBN (2 mL)
Pelarut porogen	DCM:ACN (5:20) 250 mL (presipitasi), 25 mL (ruah)
Waktu sintesis	24 jam
Suhu sintesis	70°C
Kecepatan pengadukan (presipitasi)	400 rpm

Pengembangan dan validasi metode analisis VOR, ITR, dan FLU secara simultan menggunakan KCKT. Berdasarkan uji kesesuaian sistem (UKS), seluruh parameter memenuhi kriteria. Sistem KCKT yang telah dioptimasi kemudian divalidasi. Parameter yang digunakan dalam validasi metode adalah linearitas, batas deteksi, batas kuantisasi, akurasi, dan presisi, semua parameter memenuhi persyaratan.

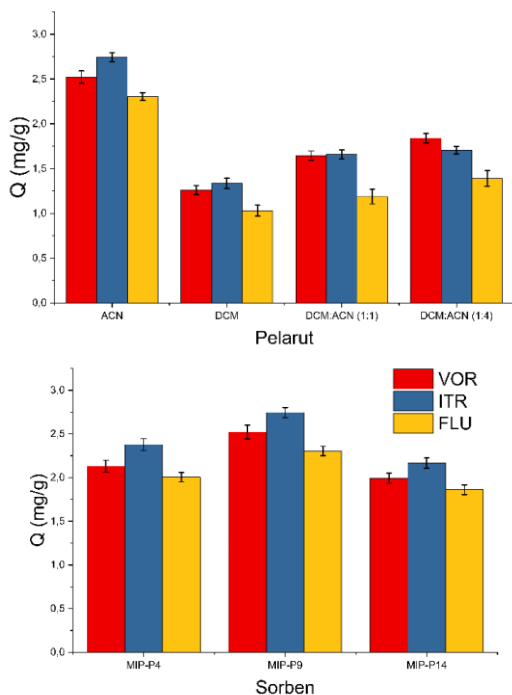


Gambar 5.15 Kromatogram hasil optimasi

Kapasitas adsorpsi MIP yang disintesis dengan metode presipitasi lebih tinggi dibandingkan dengan polimerisasi ruah. Penggunaan MT-MIP menunjukkan afinitas yang lebih baik untuk analisis VOR, ITR, dan FLU secara simultan. ACN mempunyai kemampuan adsorpsi paling tinggi dibandingkan pelarut lainnya. MIP dengan perbandingan 1:4:20 mempunyai kemampuan adsorpsi yang lebih tinggi dibandingkan dengan rasio lainnya, yang berkorelasi dengan hasil pengujian komputasi sebelumnya. MIP optimal akan digunakan untuk studi lebih lanjut.

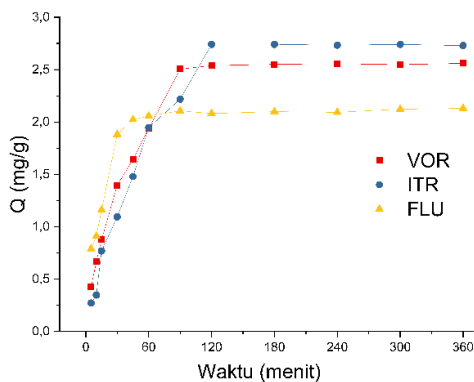


Gambar 5.16 Kapasitas adsorpsi MIP dan NIP (n=3)



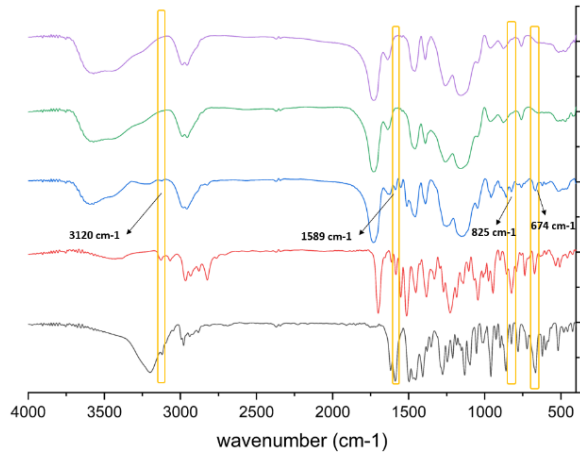
Gambar 5.17 Pengaruh pelarut (atas) dan rasio sintesis (bawah) (n=3)

Studi kinetika adsorpsi menunjukkan bahwa MIP memiliki kemampuan adsorpsi dengan ketiga molekul cetakan, dengan kesetimbangan adsorpsi tercapai dalam 2 jam pada konsentrasi antijamur triazol 5 mg/L. Berdasarkan hasil pengujian, proses adsorpsi MIP mengikuti isoterm Freundlich yang ditunjukkan dengan nilai r yang tertinggi. Nilai r model Freundlich untuk VOR, ITR, dan FLU mendekati 1 dibandingkan model lainnya.

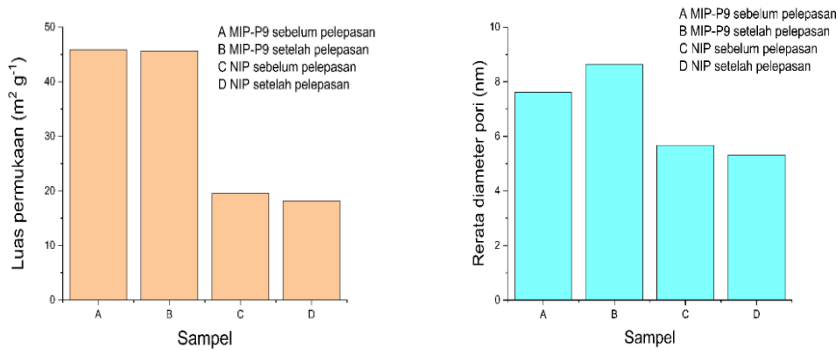


Gambar 5.18 Kinetika adsorpsi MIP

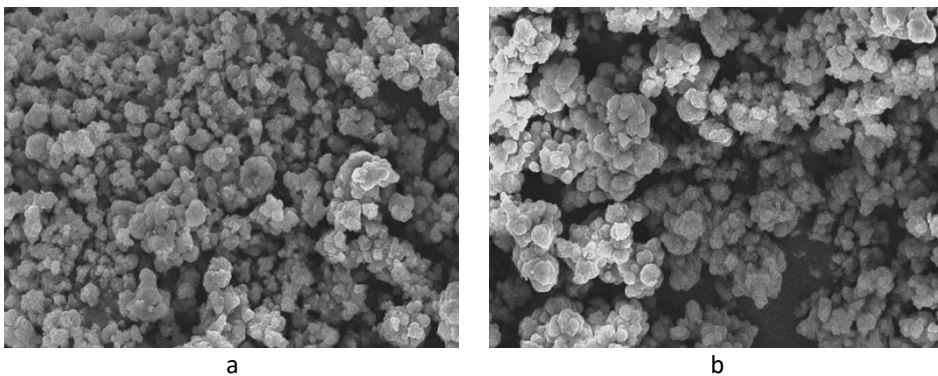
Karakterisasi dilakukan dengan pengujian FTIR, SEM-EDX, TGA, PSA, dan BET.

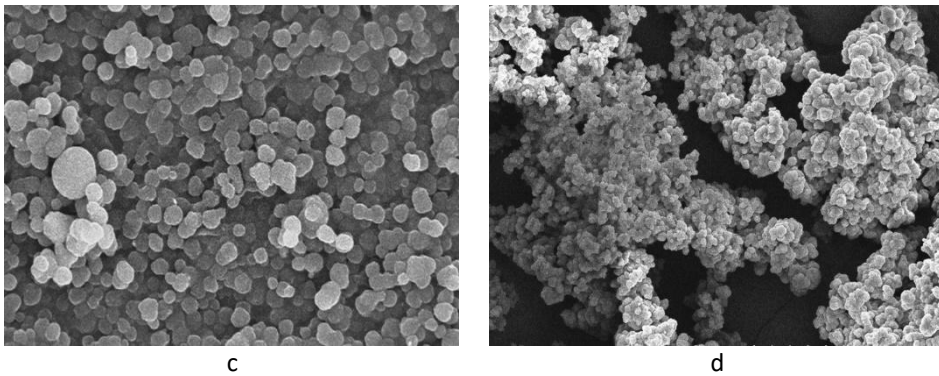


Gambar 5.19 Overlay spektrum IR VOR (hitam), ITR (merah), MIP sebelum ekstraksi (biru), MIP setelah ekstraksi (ungu), dan NIP (hijau).

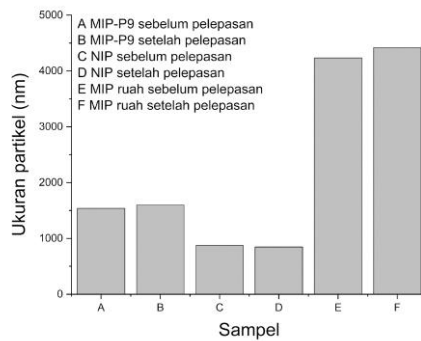


Gambar 5.20 Luas permukaan dan diameter pori MIP dan NIP

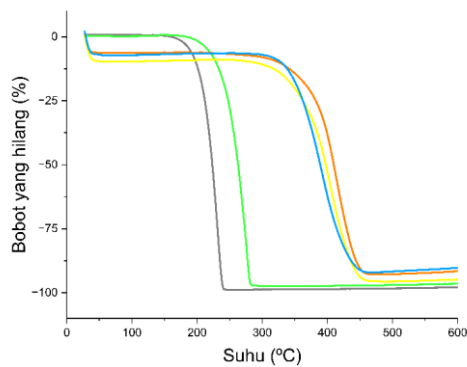




Gambar 5.21 Analisis SEM MIP-P9 sebelum ekstraksi (a), setelah ekstraksi (b), NIP-P10 (c), dan MIP-B9 (d)



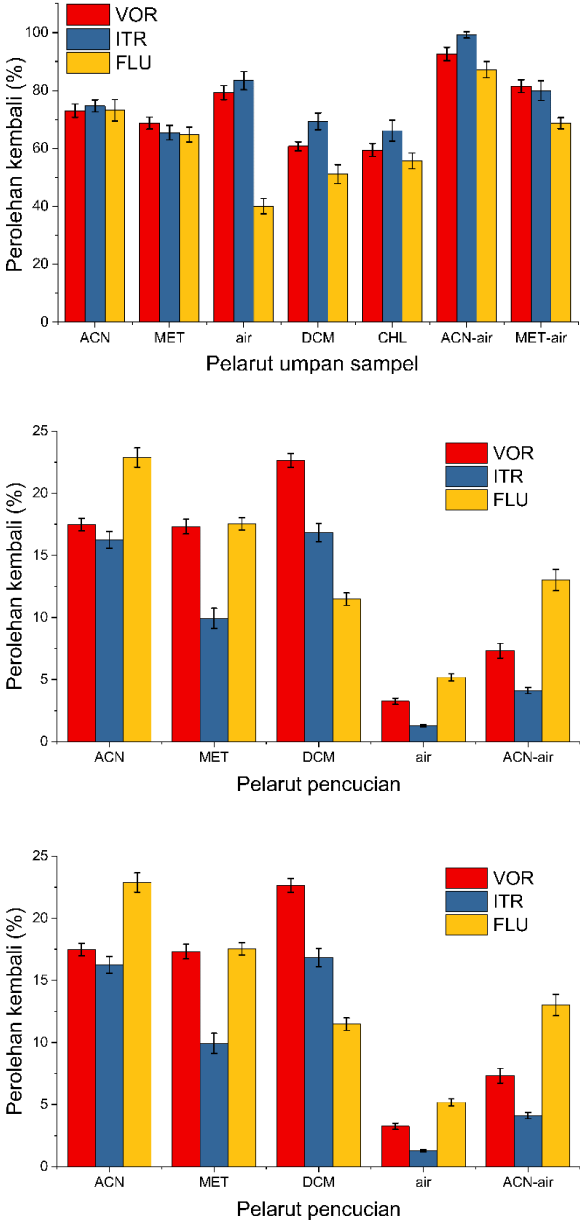
Gambar 5.22 Ukuran partikel MIP dan NIP



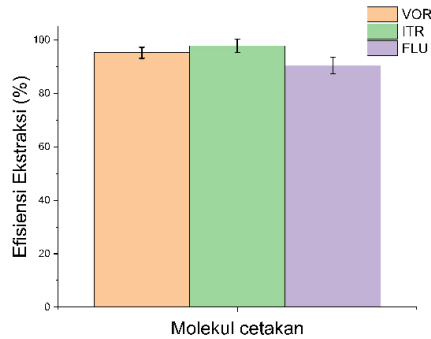
Gambar 5.23 Analisis TGA VOR (hitam), IR (hijau), MIP sebelum ekstraksi (oranye), MIP setelah ekstraksi (kuning), dan NIP (biru)

Pengujian dilakukan untuk mengevaluasi efektivitas *cartridge* yang mengandung partikel MIP sebagai sorben untuk SPE, *Molecularly Imprinted Polymer Solid-Phase Extraction* (MISPE). Untuk mencapai efisiensi ekstraksi maksimum dilakukan optimasi sistem SPE, termasuk pengkondisian, umpan

sampel, pencucian, dan elusi. Pengkondisian MISPE dilakukan dengan menggunakan MET dan ACN sebagai pelarut organik, diikuti oleh air. Hasil pengujian menunjukkan bahwa pelarut optimal untuk proses umpan sampel adalah ACN:air (1:1). Pengujian efisiensi ekstraksi dapat diamati bahwa efisiensi standar triazol berada di antara rentang 90-98 %.

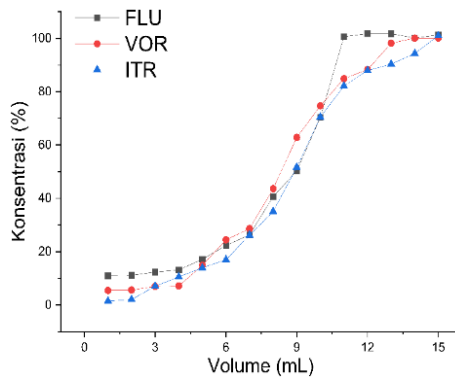


Gambar 5.24 Optimasi sistem MISPE (n=3)

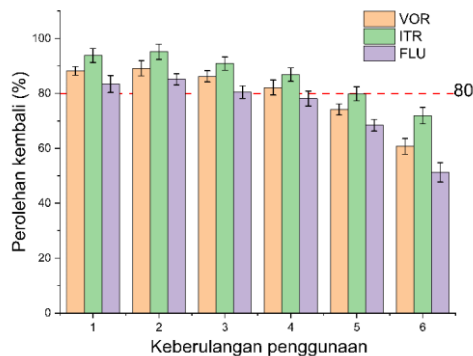


Gambar 5.25 Efisiensi ekstraksi (n=3)

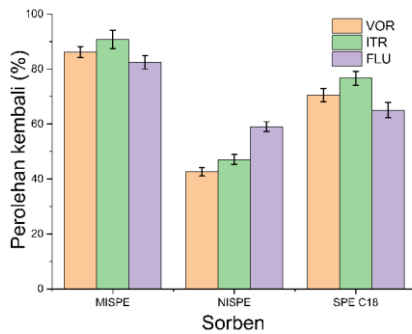
Selanjutnya MISPE dikarakterisasi dengan penentuan *Volume Breakthrough* (VB) dan keberulangan pemakaian. Kinerja sorben MISPE dibandingkan dengan NISPE dan SPE C₁₈ yang ada di pasaran. Hasil penelitian menunjukkan bahwa MISPE memiliki afinitas yang lebih baik dengan sampel plasma, perolehan kembali antijamur triazol pada MISPE lebih tinggi dibandingkan dengan NISPE dan SPE C₁₈.



Gambar 5.26 Pengujian volume breakthrough

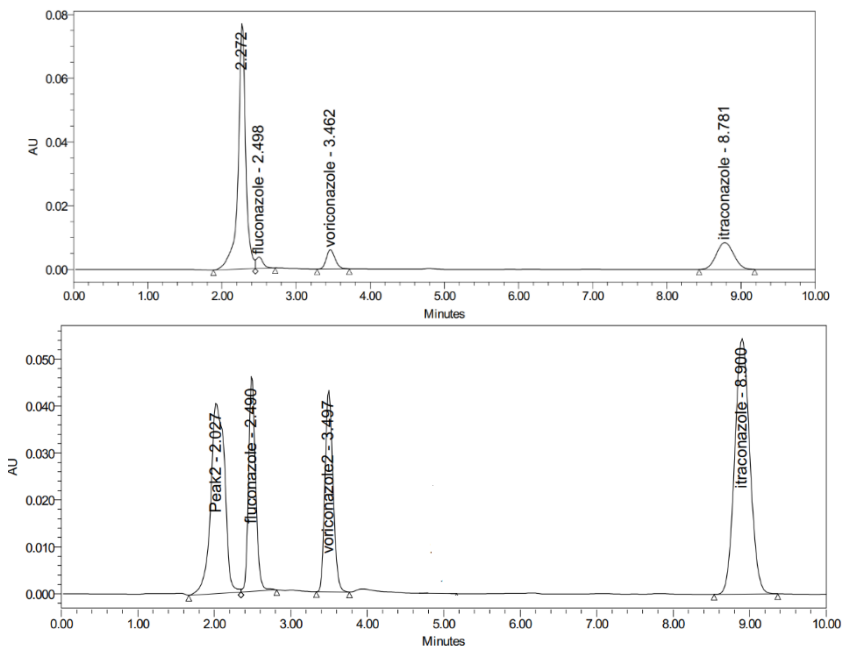


Gambar 5.27 Pengujian keberulangan pemakaian (n=3)



Gambar 5.28 Perolehan kembali MISPE, NISPE, dan SPE C₁₈ (n=3)

Evaluasi kemampuan MISPE dalam pengujian sampel plasma darah dilakukan dengan menggunakan sistem yang telah dioptimasi. Metode *spiked* sampel digunakan untuk menganalisis plasma darah manusia yang ditambahkan dengan larutan standar antijamur triazol 2,5 mg/L. Dari hasil pengujian pengaruh matriks dapat diamati bahwa rasio volume plasma:standar triazol (1:5) merupakan rasio optimal untuk menghilangkan gangguan matriks pada proses analisis. Setelah proses preparasi sampel menggunakan MISPE, pemisahan puncak plasma dan FLU yang efektif dapat dicapai. Sistem MISPE yang telah dioptimasi mampu mengekstraksi antijamur triazol dari plasma darah secara efektif, seperti yang ditunjukkan pada Gambar 6.29.



Gambar 5.29 Kromatogram spiked plasma tanpa preparasi MISPE (atas), dengan MISPE (bawah)

Kesimpulan atau kontribusi ilmiah dari penelitian ini:

1. Pengujian komputasi terhadap 39 monomer fungsional menunjukkan bahwa AA, IA, ACR, dan HEMA merupakan monomer terpilih.
2. Perbandingan konsentrasi monomer menunjukkan semakin tinggi rasio molekul cetakan: monomer fungsional maka ikatan yang terbentuk semakin kuat, dengan rasio 1:4 merupakan rasio yang optimal dengan asetonitril merupakan pelarut yang terbaik untuk sintesis MIP.
3. Optimasi sintesis terhadap jenis monomer, inisiator, pelarut, waktu, suhu menunjukkan bahwa rendemen hasil sintesis MIP presipitasi lebih besar dibandingkan metode ruah dengan menggunakan pelarut asetonitril untuk adsorpsi.
4. Kesetimbangan adsorpsi tercapai dalam 2 jam dan mengikuti kinetika orde dua semu dan MIP mengikuti isoterm Freundlich.
5. Karakterisasi dengan FTIR, SEM, TGA, PSA, dan BET menunjukkan pembentukan MIP dan NIP serta pelepasan molekul cetakan dari MIP.
6. MISPE yang dibuat telah menunjukkan pengujian keberulangan, lebih selektif dan mampu mengekstraksi antijamur triazol dari plasma darah.

5.3 Sintesis, Karakterisasi, dan Aplikasi Polimer Tercetak Molekul untuk Analisis Enoksaparin dalam Matriks Biologis

(Engrid Juni Astuti, Muhammad Ali Zulfikar, Slamet Ibrahim, Sophi Damayanti)

Beberapa pasien COVID-19 dapat memberikan respons terjadinya “badai sitokin”, yaitu pelepasan sitokin dan molekul proinflamasi yang tidak terkendali seperti IL-1 β , IL-6 dan *Monosit Chemo-attractant Protein* (MCP)-1 yang berhubungan erat dengan kerusakan paru-paru (Y. Liu, dkk., 2020)(Abou Baker, 2022)(Gralinski, dkk., 2018). WHO merekomendasikan heparin dosis profilaksis atau LMWH untuk pencegahan *Venous Thrombo Embolism* (VTE) pada pasien dewasa dan remaja yang dirawat di rumah sakit karena Covid-19 dengan gejala parah kecuali jika dikontraindikasikan. Hal yang sama juga dilakukan oleh *US Centers for Disease Control and Prevention* (CDC) dan Departemen Pertahanan (DoD) (Maldonado, dkk., 2020).

Pemberian antikoagulan jenis heparin memiliki risiko, oleh karena itu, pasien dengan gangguan ginjal berat memerlukan pemantauan dengan cermat untuk pengobatan dengan enoksaparin terhadap perdarahan (Nutescu, dkk., 2009).

Tantangan membuat MIP untuk senyawa makromolekul atau biomakromolekul adalah kebanyakan senyawanya larut dalam air, berbeda dengan MIP yang menggunakan cetakan senyawa dengan berat molekul rendah yang kelarutannya dalam pelarut nonpolar.

Pada penelitian ini dibuat MIP yang spesifik untuk enoksaparin menggunakan metode *microwave* dan pengadukan stirer dengan pelarut air. Sebelum dilakukan sintesis terlebih dahulu dilakukan uji *in silico* untuk pemilihan monomer fungsional yang akan digunakan dan juga komposisi perbandingannya. MIP yang dibuat dilakukan karakterisasi dan diukur kemampuan adsorpsinya. Pada tahap akhir MIP diaplikasikan untuk pemisahan enoksaparin dari plasma darah.

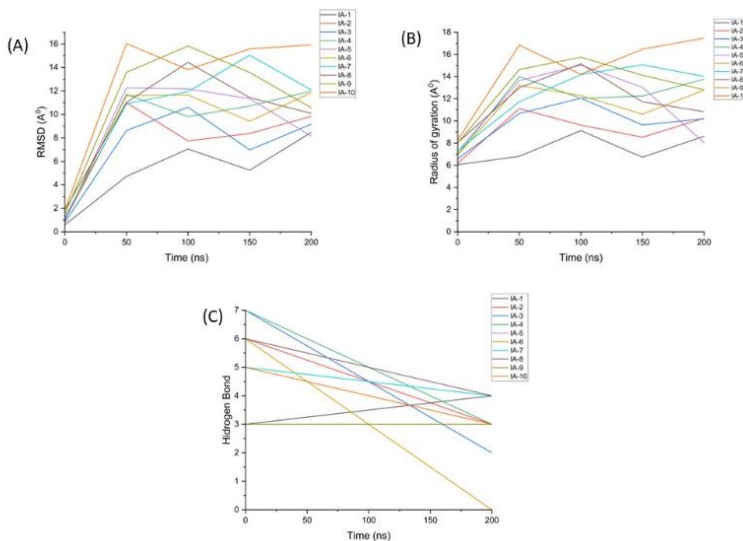
Tujuan dari penelitian adalah melakukan desain komputasi MIP bercetakan enoksaparin untuk penentuan monomer fungsional dan rasio yang terbaik, melakukan sintesis dan karakterisasi MIP yang bercetakan enoksaparin, melakukan pengembangan dan validasi metode untuk analisis enoksaparin dan melakukan pengujian MIP untuk adsorben dalam matriks biologis.

Pada penelitian ini metode *ab initio* menggunakan RHF dengan basis set 3-21G dan DFT B3LYP dengan basis set 3-21G. Perhitungan ΔE dan ΔG menggunakan *ab initio* dapat dilihat bahwa monomer fungsional terbaik adalah asam itakonat dengan nilai ΔE dan ΔG berturut-turut adalah $-45,6419$ dan $-30,1186$. DFT monomer fungsional terbaik adalah asam itakonat dengan nilai ΔE dan ΔG berturut-turut adalah $-62,3199$ dan $-40,8691$.

Langkah selanjutnya adalah perhitungan perbandingan molar antara enoksaparin dengan asam itakonat menggunakan DFT dan GFN2-xTB. Hasil ΔE berbagai perbandingan molar antara enoksaparin dengan asam itakonat menggunakan DFT dan ΔE serta ΔG berbagai perbandingan molar antara enoksaparin dengan asam itakonat menggunakan GFN2-xTB. Perbandingan terbaik adalah 1:6 menggunakan DFT dan GFN2-xTB. ΔG dengan kisaran minus 15–30 kkal/mol memiliki ikatan hidrogen yang kuat. Berdasarkan ΔG terlihat bahwa pada suhu 301 K reaksi dapat berjalan spontan pada suhu kamar karena enoksaparin stabil di bawah suhu kamar.

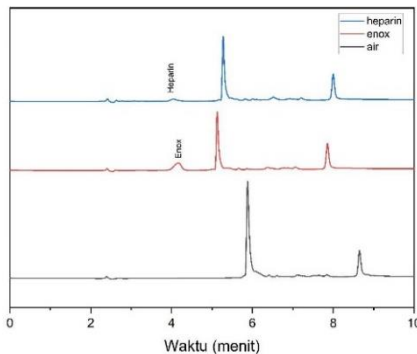
Uji dinamika molekuler dilakukan untuk memastikan interaksi yang dihasilkan dapat bertahan dalam jangka waktu tertentu Simulasi dinamika

molekular menggunakan perangkat lunak YASARA (22.9.24.W.64) dengan menentukan stabilitas konformasi terbaik untuk enoksaparin dan asam itakonat.



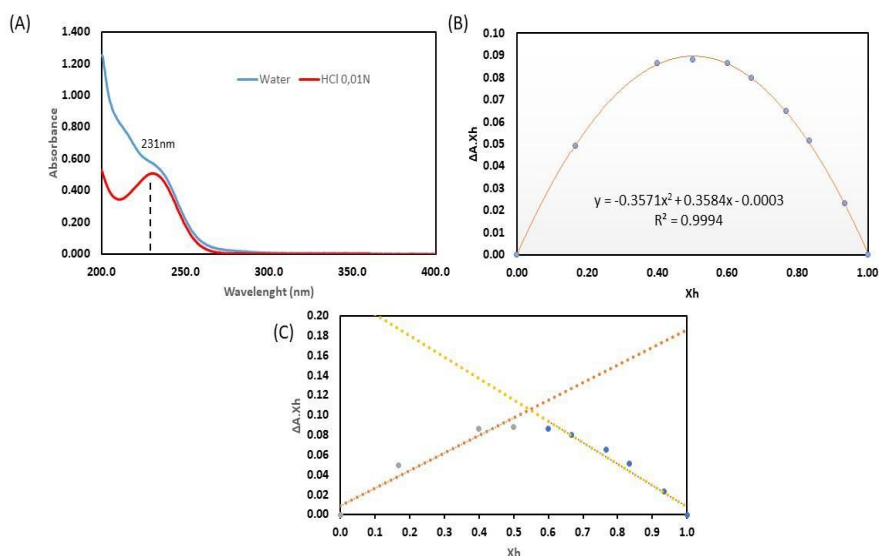
Gambar 5.30 Hasil perhitungan (A) RMSD, (B) Rg, dan (C) interaksi ikatan hidrogen antara enoksaparin dengan asam itakonat dari perbandingan 1:1 sampai 1:10 menggunakan simulasi dinamika molekular.

Pengembangan dan validasi metode analisis dilakukan menggunakan metode spektrofotometri UV-VIS dan KCKT. Metode spektrofotometri UV-VIS digunakan untuk analisis kapasitas adsorpsi polimer. Metode KCKT digunakan untuk mengukur selektivitas polimer antara enoksaparin dan heparin. Penetapan kadar enoksaparin memenuhi kriteria akurasi, presisi dan linieritas sehingga dapat digunakan pada pengujian di laboratorium.



Gambar 5.31 Kromatogram air, enoksaparin 500 mg/L, dan heparin 500 mg/L

Hasil percobaan Analisis Job Plot menunjukkan puncak maksimum pada ekuivalen 0,55 yang menunjukkan perbandingan kompleks pembentukan antara enoksaparin dengan asam itakonat adalah 1:1 dengan menggunakan perhitungan polinomial. Perhitungan juga dilakukan dengan perpotongan dua garis regresi dan hasil perpotongan menunjukkan ekuivalen sebesar 0,55 atau perbandingan 1:1 antara enoksaparin dan asam itakonat seperti terlihat pada Gambar 5.32.

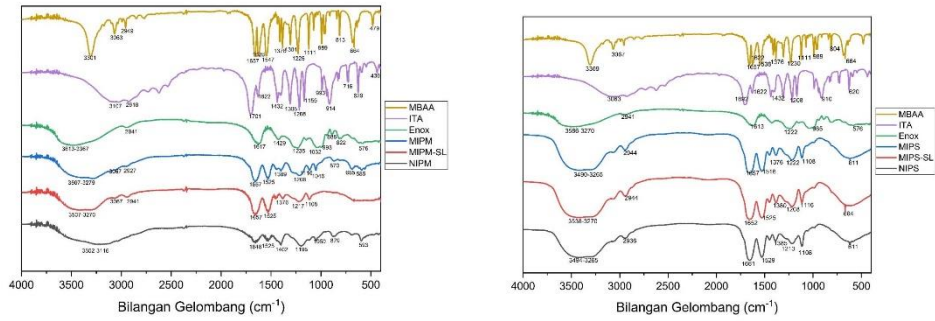


Gambar 5.32 Percobaan perbandingan molar enoksaparin dengan asam itakonat. (A) Pelarut untuk enoksaparin, (B) perhitungan polinomial, dan (C) perpotongan dua garis regresi.

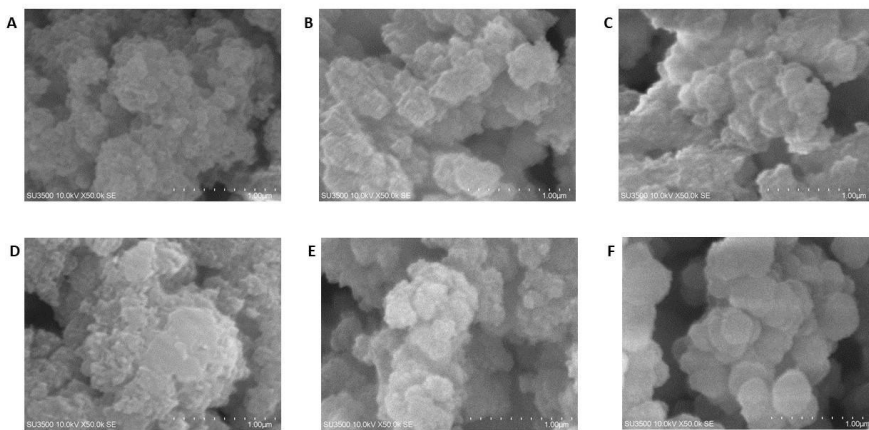
Sintesis MIP dilakukan menggunakan dua metode, yaitu *microwave* dan pengadukan *stirrer*. Waktu sintesis yang terbaik hasil optimasi adalah 90 menit, daya 300 watt dan jumlah perbandingan monomer adalah 1:1 pada suhu sintesis 28 °C.

Formula yang digunakan adalah perbandingan 1:1 antara enoksaparin dengan asam itakonat sesuai dengan hasil optimasi terbaik menggunakan *microwave*. Kecepatan pengadukan yang digunakan adalah 400 rpm. Suhu yang digunakan pada sintesis ini adalah suhu ruangan.

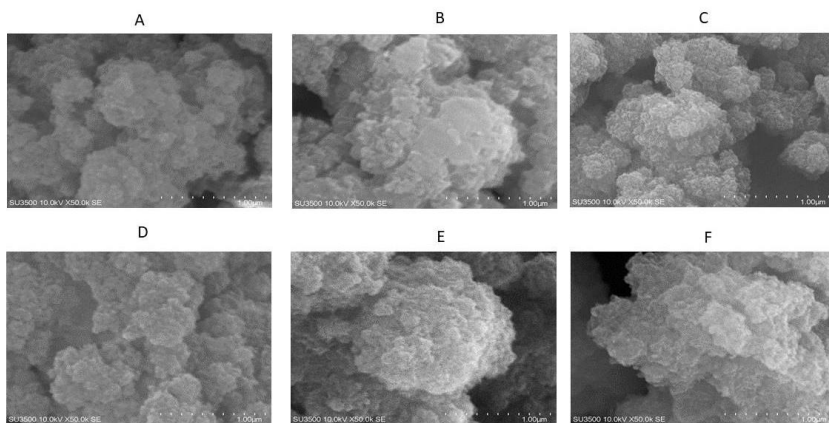
Karakterisasi dilakukan dengan IR, SEM, TGA, PSA dan Zeta Potensial, dan BET.



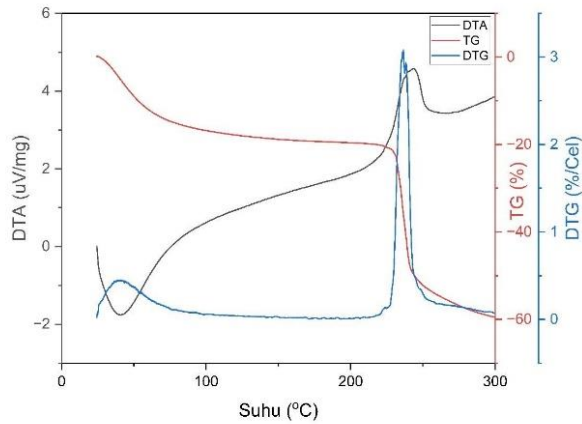
Gambar 5.33 Spektrum FTIR (A) disintesis dengan *microwave* (B) disintesis dengan *stirrer*



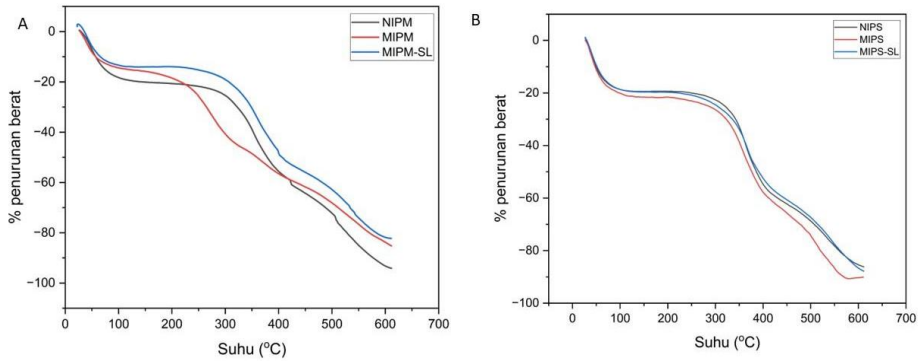
Gambar 5.34 Hasil SEM metode *microwave* sebelum pelepasan (A) NIP 1:1, (B) NIP 1:4, (C) NIP 1:6, (D) MIP 1:1, (E) MIP 1:4, (F) MIP 1:6



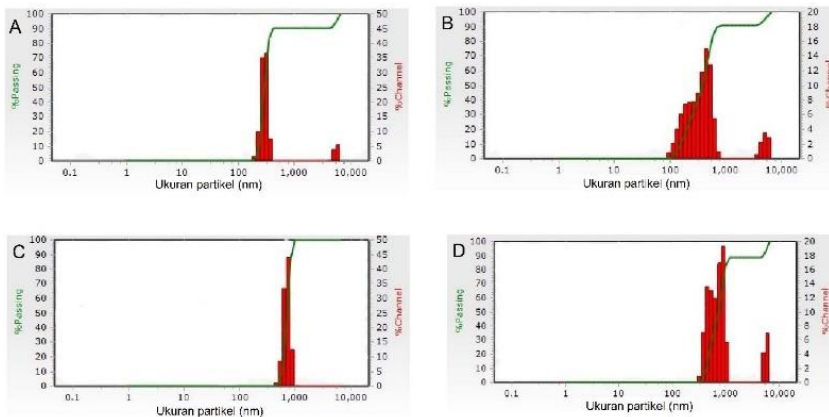
Gambar 5.35 Hasil SEM metode *microwave* dan *stirrer* (A) NIPM, (B) MIPM, (C) MIPM setelah pelepasan, (D) NIPS, (E) MIPM, (F) MIPM setelah pelepasan



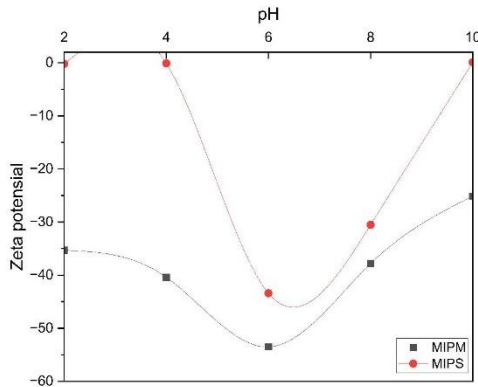
Gambar 5.36 Karakterisasi TGA enoksaparin



Gambar 5.37 Karakterisasi TGA NIP, MIP dan MIP setelah pelepasan (A) *microwave*, (B) *stirrer*



Gambar 5.38 Hasil pengujian PSA (A)MIPM, (B)NIPM, (C)MIPS, dan (D)NIPS



Gambar 5.39 Hasil pengujian zeta potensial

Tabel 5.3 Hasil karakterisasi dengan BET

Polimer	Luas permukaan (m ² /g)	Volume pori (cc/g)	Diameter pori (nm)
MIPM	20,186	0,037	4,260
NIPM	4,786	0,014	26,376
MIPS	7,439	0,015	25,402
NIPS	3,796	0,010	25,616

Kemampuan adsorpsi dari polimer yang disintesis menggunakan *microwave* dengan perbandingan 1:1, 1:4 dan 1:6 dilihat dengan mencampurkan larutan baku enoksaparin dengan massa sorben MIP dan NIP sebanyak 10 mg. Kapasitas adsorpsi MIPM 1:1, 1:4, dan 1:6 adalah $43,47 \pm 0,40$, $24,68 \pm 0,46$, dan $22,31 \pm 0,55$ mg/g, sedangkan NIPM 1:1, 1:4, dan 1:6 memiliki kapasitas adsorpsi sebesar $36,00 \pm 0,30$, $35,83 \pm 0,50$, dan $32,36 \pm 0,43$ mg/g. *Imprinting factor* (IF) digunakan untuk mengevaluasi efektivitas MIP, dengan IF yang lebih tinggi menunjukkan kinerja yang lebih unggul. Kinerja MIP dinilai memuaskan karena menunjukkan *IF* melebihi 1 (Ansel, 2015). MIPM 1:1 mempunyai nilai IF sebesar 1,21, lebih besar dibandingkan perbandingan 1:4 dan 1:6, sehingga perbandingan 1:1 merupakan MIPM terbaik untuk adsorpsi enoksaparin sehingga dibuat dalam skala yang lebih besar dan juga menggunakan metode pengadukan *stirrer*.

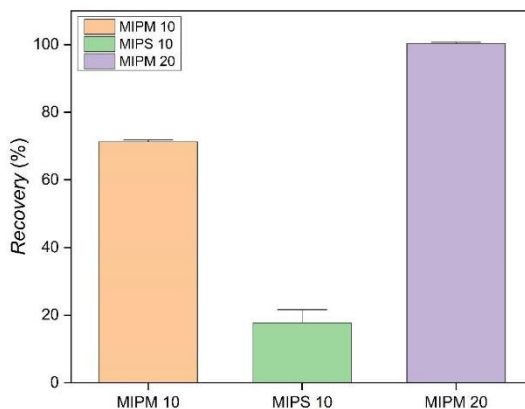
Hasil pemodelan kinetika adsorpsi dengan persamaan linier untuk MIPM, NIPM, MIPS, dan NIPS mengikuti kinetika adsorpsi untuk model orde dua semu. Hal ini dapat dilihat dari nilai koefisien korelasi yang mendekati nilai 1. Model kinetika adsorpsi orde dua semu mengasumsikan bahwa peristiwa adsorpsi terjadi pada dua sisi aktif pada permukaan adsorben (Villarante, dkk., 2017).

Pada penelitian ini juga dilakukan pemodelan isotherm adsorpsi yang menggunakan pemodelan adsorpsi isotherm Langmuir tipe 1 sampai 6, isotherm Freundlich, pemodelan nonlinier Langmuir dan Freundlich dan prediksi menggunakan isotherm SIPS dengan bantuan *software solver* pada excel. Dapat diketahui bahwa MIPM, NIPM, MIPS, dan NIPS mengikuti model adsorpsi Freundlich. Hal ini ditentukan berdasarkan nilai R^2 atau koefisien determinasi yang diperoleh dengan cara terlebih dahulu melakukan fitting nonlinier terhadap model Langmuir dan Freundlich. Selanjutnya jika hasil *fitting* nonlinier sudah dilakukan, baru diteruskan dengan melakukan *fitting* linier.

Nilai *imprinting factor* ditentukan untuk melihat kemampuan adsorpsi MIPM dan MIPS. Perhitungan *imprinting factor* dengan membandingkan kapasitas adsorpsi antara MIP dan NIP. Selain itu, pada pengujian selektivitas, dilihat bahwa MIPM memiliki nilai selektivitas yang lebih baik dibandingkan MIPS.

Pada penelitian ini juga dilakukan selektivitas menggunakan antibiotik yang sering digunakan bersama enoksaparin pada kasus operasi, yaitu sefazolin natrium.

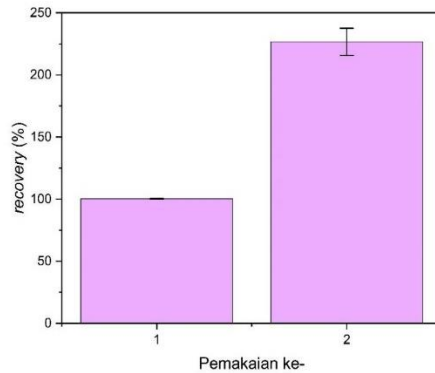
Berdasarkan hasil penggunaan MIPM dalam bentuk SPE yang tidak dapat meningkatkan % *recovery* maka untuk aplikasi dalam plasma darah digunakan dalam bentuk dispersi. Hasil % *recovery* dapat dilihat pada Gambar 6.40.



Gambar 5.40 Histogram % *recovery* enoksaparin menggunakan MIP

Gambar 5.40 memperlihatkan hasil % *recovery* enoksaparin dalam plasma menunjukkan MIPM lebih bagus dibandingkan dengan MIPS dengan jumlah

polimer 10 mg. Hasil penggunaan kembali atau *reusability* untuk MIPM menunjukkan bahwa MIPM tidak dapat digunakan kembali karena struktur polimer telah rusak setelah proses elusi menggunakan pelarut asam, hal ini dapat dilihat dari % *recovery* pada penggunaan kedua MIPM diperoleh hasil $226,72 \pm 10,93$ %. Hasil dapat dilihat pada Gambar 5.41.



Gambar 5.41 Histogram % *recovery* pemakaian berulang MIPM

Kesimpulan atau Kontribusi Ilmiah adalah:

1. Berdasarkan uji *in silico* metode *Ab initio* dan DFT diperoleh asam itakonat merupakan monomer fungsional yang paling baik berinteraksi dengan enoksaparin. Berdasarkan simulasi dinamika molekuler perbandingan terbaik antara enoksaparin dan asam itakonat adalah 1:1 dan didukung oleh hasil analisis Jobs plot.
2. Polimer yang disintesis dengan metode polimerisasi presipitasi menggunakan *microwave* (MIPM) memberikan hasil karakterisasi morfologi yang lebih baik dibandingkan yang menggunakan *stirrer* (MIPS). Hal ini dibuktikan dengan uji kemampuan adsorpsi dengan nilai kapasitas adsorpsi dan *imprinting factor* MIPM lebih baik dibandingkan dengan MIPS.
3. MIPM dan MIPS mengikuti kinetika adsorpsi model orde dua semu dan model adsorpsi isoterm Freundlich. Berdasarkan hasil adsorpsi BET diketahui MIPM memiliki luas permukaan lebih tinggi dibandingkan MIPS. Hal ini dapat dibuktikan dari nilai kapasitas adsorpsi MIPM yang lebih tinggi dibandingkan MIPS. MIPM memiliki selektivitas yang lebih tinggi terhadap enoksaparin dibandingkan heparin. MIPS kurang selektif terhadap enoksaparin.
4. MIPM mampu mengekstraksi enoksaparin lebih baik daripada MIPS dalam plasma darah.

5.4 Publikasi mengenai Penelitian Polimer Tercetak Molekul

Nama Jurnal : Composites Part C

Reputasi : Q1

Edisi : 12 (2023) 100405

Study on monomer functional suitability toward sofosbuvir in molecularly imprinted polymer: In silico and experimental study

Hilda Aprilia Wisnuwardhani^{a,e}, Slamet Ibrahim^b, Rino Rakhmata Mukti^c, Sophi Damayanti^{a,d*}

- ^a. Pharmacochemistry Research Group, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
- ^b. Faculty of Pharmacy, Universitas Jendral Achmad Yani, Cimahi, Indonesia.
- ^c. Division on Inorganic and Physical Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
- ^d. University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Indonesia
- ^e. Department of Pharmacy, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Islam Bandung, Bandung 40116, Indonesia

* Correspondence: sophi.damayanti@itb.ac.id; Tel.: +62-813-9407-5730

Abstract

Sofosbuvir (SOF) is an anti-HCV (Hepatitis C Virus) used as an off-label drug in treating COVID-19 and the usage requires good therapeutic drug monitoring, with analytical and suitable sample preparation methods. Therefore, this research aimed to apply in silico and laboratory testing in preparing SOF *Molecularly Imprinted Polymer* (MIP). MIP is expected to improve sample preparation performance. The best functional monomer and porogen selection were determined through the use of Density Functional Theory (DFT) method with the B3LYP basis set 6-31G (d,p) and molecular dynamics simulation. The association constant test and Jobs plot were determined by the UV spectrophotometry and MIP synthesis method was conducted by bulk and precipitation polymerization. The polymer particles underwent characterization using Fourier-transform infrared spectroscopy and scanning electron microscopy. The result showed that methacrylic acid (MAA) and acetonitrile were the best functional monomer and porogen for synthesis. Precipitation polymerization yielded superior outcomes in terms of polymer homogeneity and adsorption capability compared to bulk

polymerization. Polymer, MIP B, with a composition ratio of template:functional monomer:cross-linkers = 1:1:20, which was synthesized by the precipitation method, provided the best adsorption capability in all solvents tested, and had an imprinting factor of 1.15.

Keywords: Sofosbuvir, imprinted polymer, in silico study

Nama Jurnal : Journal of Molecular Liquid

Reputasi : Q1

Status : Accepted on September 13th 2024

Computational and experimental investigation on functional monomer selection for a novel molecularly imprinting polymer of remdesivir

Hilda Aprilia Wisnuwardhani^{1,5}, Slamet Ibrahim², Rino R. Mukti³, Sophi Damayanti^{1,4*}

1. Department of Pharmacochemistry, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung, Indonesia 40132
2. Faculty of Pharmacy, Universitas Jenderal Achmad Yani, Cimahi, Indonesia
3. Division on Inorganic and Physical Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung, Indonesia 40132
4. University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Indonesia
5. Department of Pharmacy, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Islam Bandung, Bandung, Indonesia 40116

*Correspondence: sophi.damayanti@itb.ac.id; Tel.: +62-813-9407-5730

Abstract

Molecularly-imprinted polymers (MIPs) are a sample preparation technique with a functional cavity that can rebind the same or similar analyte to the template. It also can increase the selectivity of the analytical method. Computational approaches are capable of making predictions about the most optimal synthesis conditions, including the most appropriate monomers and solvents. This study used the DFT method, GFN2-xTB, and molecular dynamics simulation to predict MIP synthesis's best functional monomer, solvent, and stoichiometric ratio. Remdesivir (RMD), used as a template, has also never been developed to be made as MIP. The monomers were acrylic acid (AA), 2-hydroxyethyl methacrylate (HEMA), and acrylamide (AM).

Laboratory testing, association constant, and Job plot analysis are carried out to confirm the results of computational tests. The polymer was synthesized using precipitation and characterized using SEM, FTIR, and TGA. The adsorption capacity was evaluated in two different solvents, i.e. acetonitrile (ACN) and water: ACN = 9 : 1 (v/v). Computational study results identified acrylamide as the most interactive ligand with RMD as a template. The results of molecular dynamics simulations identify that the RMD : AM = 1 : 1 complex is the most stable in terms of the radial distribution function, hydrogen bond occupancy, and Gibbs bond free energy. The adsorption ability test results show that MIP 1 and MIP 2 have imprinting factor values of 1.36 and 1.15, respectively.

Keywords: remdesivir, imprinted polymer, computational study

Nama Jurnal : Scientia Pharmaceutica

Reputasi : Q2

Edisi : 90(54), 2022

Molecularly-imprinted SERS: A Potential Method for Bioanalysis

Hilda Aprilia Wisnuwardhani^{1,2}, Slamet Ibrahim¹, Rino R. Mukti³, Sophi Damayanti^{1,4*}

1. Pharmacochemistry Research Group, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
2. Pharmacy study program, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Islam Bandung, Bandung 40116, Indonesia
3. Division on Inorganic and Physical Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
4. University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

* Correspondence: sophi.damayanti@itb.ac.id; Tel.: +62-813-9407-5730

Abstract

The most challenging step in developing bioanalytical methods is finding the best sample preparation method. The matrix interference effect of biological sample become a reason of that. Molecularly imprinted SERS become a potential analytical method to be developed to answer this challenge. In this

article, we review recent progress in MIP SERS application particularly in bioanalysis. Begin with the explanation about molecular imprinting technique and component, SERS principle, the combination of MIP SERS, and follow by various application of MIP SERS for analysis. Finally, the conclusion and future perspective were also discussed.

Keywords: molecularly imprinted polymer; surface-enhanced Raman spectroscopy; bioanalysis

Nama Jurnal : Journal of Molecular Liquids

Reputasi : Q1

Edisi : 383 (2023) 122130

Insights into the selective imprinted polymer of voriconazole from host-guest interaction perspective

Untung Gunawan^{a,f}, Slamet Ibrahim^b, Atthar Luqman Ivansyah^{c,d*}, Sophi Damayanti^{a,e*}

- ^{a.} Department of Pharmacochemistry, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
- ^{b.} Faculty of Pharmacy, Universitas Jendral Achmad Yani, Cimahi 40531, Indonesia
- ^{c.} Instrumentation and Computational Physics Research Group, Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
- ^{d.} Master Program in Computational Science, Faculty of Mathematics and Natural Science, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
- ^{e.} University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia
- ^{f.} Department of Pharmacy, School of Medicine and Health Sciences, Atma Jaya Catholic University of Indonesia, Jakarta 14440, Indonesia

*Corresponding author: sophi.damayanti@itb.ac.id; atthar@itb.ac.id

Abstract

The incidence of fungal coinfections, such as *Aspergillus* spp., in patients with COVID-19 has been widely reported. Voriconazole is the first-line treatment for aspergillosis. A challenging sample preparation process is required to perform therapeutic drug monitoring of voriconazole. Recently, *Molecularly Imprinted Polymer* (MIP) have been shown to improve the separation selectivity for biological samples. Monomer selection in MIP is often performed by trial and error, without a design strategy. Therefore, this study

aimed to construct a highaffinity MIP for voriconazole based on its interaction with functional monomers. All structures were optimized with B3LYP/6-311G++(d,p) and DFT-D3 dispersion correction method. Calculations of vacuum and solvated frequencies were carried out using a structure with maximum binding energy from molecular docking. The results showed that complex five was the most stable, exothermic, spontaneous, and enthalpy-driven among the complexes. In addition, there are nine intermolecular interactions and one moderate hydrogen bond in the QTAIM and NBO analysis, whereas hydrogen bonds, van der Waals interactions, and hydrophobic interactions were observed in the NCI-RDG analysis. The findings of this preliminary investigation showed that voriconazole possesses high stability when combined with functional monomers. It also provides information and assistance for further laboratory MIP synthesis.

Keywords: Voriconazole, Fungal coinfection, COVID-19, Host-guest interaction, DFT-calculation

Nama Jurnal : Reactive and Functional Polymers

Reputasi : Q1

Edisi : 200 (2024) 105915

Unraveling multi-template molecularly imprinted polymer for selective extraction of triazole antifungals: Theoretical and experimental investigation

Untung Gunawan^{a,f}, Slamet Ibrahim^b, Atthar Luqman Ivansyah^{c,d}, Sophi Damayanti^{a,e*}

^{a.} Department of Pharmacochemistry, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{b.} Faculty of Pharmacy, Universitas Jendral Achmad Yani, Cimahi 40531, Indonesia

^{c.} Instrumentation and Computational Physics Research Group, Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{d.} Master Program in Computational Science, Faculty of Mathematics and Natural Science, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{e.} University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{f.} Department of Pharmacy, School of Medicine and Health Sciences, Atma Jaya Catholic University of Indonesia, Jakarta 14440, Indonesia

*Corresponding author: sophi.damayanti@itb.ac.id

Abstract

Fungal coinfection is an emerging problem in the COVID-19 pandemic. *Aspergillus* and *Candida* species are the most prevalent pathogens. Therapeutic drug monitoring of triazole antifungals as a first-line therapy is required to increase their effectiveness and minimize toxicity. Bioanalysis of triazole antifungals requires selective extraction because of the complexity of matrices. *Molecularly Imprinted Polymer* (MIP) are potential solutions for increasing selectivity. This study aimed to synthesize a selective MIP sorbent to simultaneously determine voriconazole, itraconazole, and fluconazole concentrations through computational and laboratory studies. The host-guest interaction was used in the selection of monomer and solvent. The synthesis was optimized by precipitation and bulk methods using single and multi-template. Adsorption tests, characterizations, and application to the sample were performed to analyze the MIP performance. The optimal synthesis obtained using the precipitation method with mol ratio of template:monomer:crosslinker was 1:4:20. Adsorption equilibrium was established within 3 h and following pseudo-second-order kinetic. The MIP-P9 provided the highest adsorption capacity and followed the Freundlich isotherm. Characterization of MIP confirmed the successful synthesis and template removal of MIP. MIP was selective to triazole antifungals and had higher recovery than NIP and SPE C18. Based on these findings, MIP can be utilized for direct separation in clinical analysis.

Keywords: COVID-19, Fungal coinfection, Triazole antifungal, Bioanalysis, MIP

Nama Jurnal : Pharmacia

Reputasi : Q2

Edisi : 70(4), 2023

Separation and analysis of triazole antifungal in biological matrices by liquid chromatography: a review

Untung Gunawan^{a,f}, Slamet Ibrahim^b, Atthar Luqman Ivansyah^{c,d}, Sophi Damayanti^{a,e*}

^{a.} Department of Pharmacochemistry, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{b.} Faculty of Pharmacy, Universitas Jendral Achmad Yani, Cimahi 40531, Indonesia

^{c.} Instrumentation and Computational Physics Research Group, Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{d.} Master Program in Computational Science, Faculty of Mathematics and Natural Science, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{e.} University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^{f.} Department of Pharmacy, School of Medicine and Health Sciences, Atma Jaya Catholic University of Indonesia, Jakarta 14440, Indonesia

*Corresponding author: sophi.damayanti@itb.ac.id

Abstract

Invasive fungal infections cause serious illness and death worldwide. Long-term therapeutic and preventative use of antifungal drugs in high-risk patients has caused resistance. Triazole antifungals are widely used to prevent and treat fungal infections, and therapeutic drug monitoring has been suggested to improve outcomes, reduce toxicity, and prevent drug resistance. Common methods used for monitoring triazole antifungal drugs in biological matrices such as blood, serum, and plasma include bioassay and instrumentation methods, especially liquid chromatography. Sample preparation is needed to remove interference from liquid chromatography for reliable results. This paper evaluates the use of liquid chromatography to analyze triazole antifungal agents. We provided various chromatographic techniques combined with different detector types to analyze triazole antifungal drugs in biological matrices. We also compared chromatography systems with different sample preparation methods in order to select the most suitable analytical method for bioanalysis.

Keywords: Fungal infection, Triazole, Bioanalysis, Sample preparation, Liquid chromatography

Nama Jurnal : Reactive and Functional Polymers

Reputasi : Q1

Edisi : 194 (2024) 105778

In silico and experimental study of functionalized monomer for molecularly imprinted-enoxaparin polymer: A novel green approach

Engrid Juni Astuti ^{a,e}, Benny Permana ^a, Slamet Ibrahim ^b, Muhammad Ali Zulfikar ^c, Sophi Damayanti ^{a,d,*}

^a Department of Pharmacochemistry, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^b Faculty of Pharmacy, Universitas Jenderal Achmad Yani, Cimahi 40633, Indonesia

^c Division on Analytical Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^d University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AI-VLB), Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia

^e Department of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Universitas Muhammadiyah Malang, Malang 65145, Indonesia

*Corresponding author at: Department of Pharmacochemistry, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Bandung 40132, Indonesia. E-mail address: sophi.damayanti@itb.ac.id (S. Damayanti).

ABSTRACT

Enoxaparin (enox) is a low molecular weight heparin. Enox, which has side effects of thrombocytopenia and bleeding, requires monitoring drug therapy. The analysis method of enox in the blood plasma matrix needs a prior separation method. There has not been a molecularly imprinted polymer (MIP) synthesis for enox in earlier studies. Therefore, a novel MIP of enox was synthesized *via* microwave synthesizer workstation. This research aims to examine the application of *in silico* studies in selecting functional monomers and their comparison with enoxaparin before carrying out MIP synthesis. Enox as a template was polymerized with itaconic acid (ITA) as the best functional monomer; *N,N'*-methylenebisacrylamide as a cross-linking agent; water as a porogen; and ammonium persulfate as an initiator. Itaconic acid was selected using the *in silico* to calculate binding energy, and Gibbs free energy gives the smallest values. Itaconic acid and enoxaparin ratio was

computed using DFT, and GFN2-xTB found that 1:6 was the best ratio. For calculations using molecular dynamics simulations, it was found that a ratio of 1:1 was the best, the same as in laboratory experiments using the job's plot. Polymerization was performed using a microwave at room temperature (28 °C) with an ITA ratio of 1:1, 1:4, and 1:6. Nonimprinted polymers (NIP) were similarly prepared without a template as a control. All polymer particles were characterized by spectral (Fourier-transform infrared spectroscopy), thermal (thermogravimetric analysis–differential thermal gravimetry), and morphology (scanning electron microscope). The adsorption capacity for enox was carried out with MIP and NIP. The performance of MIP was evaluated by determining the imprinting factors calculated. The MIP 1:1, 1:4, and 1:6 displayed imprinting factor is 1.21, 0.68, and 0.68, respectively. The best ratio of ITA to Enox is 1:1.

Keywords: Enoxaparin; In silico study; MIP; Green chemistry; Microwave synthesizer workstation.

Nama Jurnal : Indonesian Journal of Chemistry

Reputasi : Q3

Edisi : 2024, 24 (2), 606 - 626

A Deep Overview of Anticoagulant Drugs: Recent Synthesis and Their Activity Assay

Engrid Juni Astuti ^{1,2}, Slamet Ibrahim ^b, Muhammad Ali Zulfikar ^c, Sophi Damayanti ^{a,d,*}

¹ Pharmacochemistry Research Group, School of Pharmacy, Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha No. 10, Bandung 40132, Indonesia

² Department of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Universitas Muhammadiyah Malang, Jl. Bendungan Sutami No. 188, Malang 65145, Indonesia

³ Faculty of Pharmacy, Universitas Jenderal Achmad Yani, Jl. Terusan Jenderal Sudirman, Cimahi 40633, Indonesia

⁴ Division on Analytical Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha No. 10, Bandung 40132, Indonesia

⁵ University Center of Excellence on Artificial Intelligence for Vision, Natural Language Processing & Big Data Analysis (U-CoE AIVLB), Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha No. 10, Bandung 40132, Indonesia

* Corresponding author: email: sophi.damayanti@itb.ac.id

ABSTRACT

During the unprecedented COVID-19 pandemic, anticoagulant drugs have emerged as a crucial component of treatment alongside antiviral medications. Patients with severe COVID-19 frequently have critical conditions marked by blood clot development, necessitating the administration of anticoagulants. This review aims to provide a comprehensive overview of various anticoagulant drugs, their synthesis methods, and assays employed to predict their anticoagulant activity. Notable anticoagulant categories frequently utilized include oral anticoagulants heparin, nonvitamin K antagonists, and vitamin K antagonists. In recent years, the development of new anticoagulants has seen a shift towards a multifaceted approach that combines *in silico* prediction with *in vitro* and *in vivo* assays. *In silico* prediction techniques play a pivotal role in the initial screening process. This integrated approach has yielded promising results, paving the way for the synthesis of novel anticoagulant candidates, as substantiated by a battery of *in vitro*, *in vivo*, and *ex-vivo* tests.

Keywords: anticoagulant; prediction; synthesis; anticoagulant activity

6 TANTANGAN KE DEPAN

1. Perkembangan terkini sediaan Farmasi akan diformulasi dalam bentuk multikomponen sehingga Farmakope Indonesia perlu memperbanyak monografi obat dalam bentuk multikomponen.
2. Pengembangan bahan alam di Indonesia dengan matriks yang lebih kompleks membutuhkan metode pemisahan analisis yang lebih selektif.
3. Monitoring penggunaan obat dalam tubuh manusia menghadapi tantangan dengan adanya matriks yang kompleks terutama untuk obat yang larut air.
4. Aplikasi selain pengobatan di masa depan adalah pengembangan untuk analisis doping yang juga dianalisis dengan cairan tubuh maka penggunaan MIP akan diperlukan.

7 DAFTAR PUSTAKA

- Abou Baker, D. H. (2022). Can natural products modulate cytokine storm in SARS-CoV2 patients? *Biotechnology Reports*, 35(June), e00749. <https://doi.org/10.1016/j.btre.2022.e00749>
- Alvarez-lorenzo, C. (n.d.): Handbook of Molecularly Imprinted Polymers
Handbook of Molecularly Imprinted Polymers. Ifile:///C:/Users/MAHDI/Downloads/Alvarez-Lorenzo, Carmen_Concheiro, Angel - Handbook of Molecularly Imprinted Polymers (2014-01-09, iSmithers Rapra Publishing) (1).pdfmprinted Polymers.
- Ansell R.J. Characterization of the Binding Properties of Molecularly Imprinted Polymers. *Adv. Biochem. Eng. Biotechnol.* 2015;150:51–93. doi: 10.1007/10_2015_316.
- Arabi, M., Ostovan, A., Reza, A., Guo, X., Wang, L., Li, J., Wang, X., Li, B., and Chen, L. (2020): Trends in Analytical Chemistry Strategies of molecular imprinting-based solid-phase extraction prior to chromatographic analysis, 128.
- Boukadida, M., Anene, A., Jaoued-Grayaa, N., Chevalier, Y., and Hbaieb, S. (2022): Choice of the functional monomer of molecularly imprinted polymers: Does it rely on strong acid-base or hydrogen bonding interactions?, *Colloids and Interface Science Communications*, 50(August), 100669. <https://doi.org/10.1016/j.colcom.2022.100669>
- Chen, L., Wang, X., Lu, W., Wu, X., and Li, J. (2016a): Molecular imprinting: perspectives and applications, *Chemical Society Reviews*, 45(8), 2137–2211. <https://doi.org/10.1039/C6CS00061D>
- Chen, L., Wang, X., Lu, W., Wu, X., and Li, J. (2016b): Molecular imprinting: Perspectives and applications, *Chemical Society Reviews*, 45(8), 2137–2211. <https://doi.org/10.1039/c6cs00061d>
- Chen, L., Xu, S., and Li, J. (2011): Recent advances in molecular imprinting technology: Current status, challenges and highlighted applications, *Chemical Society Reviews*, 40(5), 2922–2942. <https://doi.org/10.1039/c0cs00084a>

- Cheong, W. J., Yang, S. H., and Ali, F. (2013): Molecular imprinted polymers for separation science: A review of reviews, *Journal of Separation Science*.
- Christian G.D. Analytical chemistry, 6th. John Wiley & sons. Inc. 2004.
- Crosby, Philip B. (1979), *Quality is free : The Art of Making Quality Certain*, New York : New American Library
- Das, R. S., Wankhade, A. V., and Kumar, A. (2021): Computationally designed ionic liquid based molecularly imprinted@ graphene oxide composite: Characterization and validation, *Journal of Molecular Liquids*, 341. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116925>
- Douglas A. Skoog, F. James Holler, Stanley R. (2017), *Crouch Principles of Instrumental Analysis*, Ed. 7, Cengage Learning,
- Engrid Juni Astuti, 2024, *Sintesis, Karakterisasi dan Aplikasi Polimer Tercetak Molekul untuk Analisis Enoksaparin dalam Matriks Biologis*, Disertasi Program Doktor, Institut Teknologi Bandung
- Engrid Juni Astuti, Benny Permana, Slamet Ibrahim, Muhammad Ali Zulfikar, Sophi Damayanti: "In silico and experimental study of functionalized monomer for molecularly imprinted-enoxaparin polymer: A novel green approach", *Reactive and Functional Polymers*, Volume 194, January 2024, 105778. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2023.105778>
- Engrid Juni Astuti, Slamet Ibrahim, Muhammad Ali Zulfikar, Sophi Damayanti: "A Deep Overview Of Anticoagulant: Recent Synthesis And Its Activity Assay: A Review", *Indonesian Journal of Chemistry*, Volume 24, No.2, 2024. <https://doi.org/10.22146/ijc.87252>
- Fahim, A. M., and Magd, E. E. A. El (2021): Enhancement of Molecular imprinted polymer as organic fillers on bagasse cellulose fibers with biological evaluation and computational calculations, *Journal of Molecular Structure*, 1241, 130660. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130660>
- Gralinski, L. E., Sheahan, T. P., Morrison, T. E., Menachery, V. D., Jensen, K., Leist, S. R., Whitmore, A., Heise, M. T., & Baric, R. S. (2018). Complement Activation Contributes to Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus Pathogenesis. *MBio*, 9(5). <https://doi.org/10.1128/mBio.01753-18>

- Hashim SN, Boysen RI, Schwarz LJ, Danylec B, Hearn MT. A comparison of covalent and non-covalent imprinting strategies for the synthesis of stigmasterol imprinted polymers. *J Chromatogr A*. 2014 Sep 12;1359:35-43. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2014.07.034>
- Hilda Aprilia Wisnuwardhani, Slamet Ibrahim, Rino R. Mukti, Sophi Damayanti : "Study on monomer functional suitability toward sofosbuvir in molecularly imprinted polymer: In silico and experimental study", *Composites part C: Open Access*, Volume 12, October 2023, ISSN:2666-6820, Publisher: Elsevier B.V., Editor: Prof. Antonio J. M. Ferreira, Ph.D, H index: 16, Q2, SJR: 0,699 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.jcomc.2023.100405>, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666682023000610>
- Hilda Aprilia Wisnuwardhani, Slamet Ibrahim, Rino R. Mukti, Sophi Damayanti : "Molecularly-Imprinted SERS: A Potential Method for Bioanalysis", *Scientia Pharmaceutica*, Volume 90, Issue 3, 2022, Artikel 54, ISSN: 2218-0532, Publisher: MDPI AG, Editor: Prof. Dr. Helmut Viernstein, H index 46, Q2, SJR 0,547 (2021), <https://www.mdpi.com/2218-0532/90/3/54> , <https://www.mdpi.com/journal/scipharm>
- Hilda Aprilia, Pengembangan dan Karakterisasi Polimer Tercetak Molekul dan Nanokomposit Tercetak Molekul sebagai Kandidat Sorben Selektif untuk Analisis Sofosbuvir dalam Plasma Darah, Disertasi dan Ringkasan
- Hilda Aprilia, Pengembangan dan Karakterisasi Polimer Tercetak Molekul dan Nanokomposit Tercetak Molekul sebagai Kandidat Sorben Selektif untuk Analisis Sofosbuvir dalam Plasma Darah, Disertasi Program Doktor, Institut Teknologi Bandung
- Holland, N., Frisby, J., Owens, E., Hughes, H., Duggan, P., & McLoughlin, P. (2010). The influence of polymer morphology on the performance of molecularly imprinted polymers. *Polymer*, 51(7), 1578–1584. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2009.10.035>
- Jason Martin Mattias Hans Elg Ida Gremyr, *The Many Meanings of Quality: Towards a Definition in Support of Sustainable Operations* November

2020 Total Quality Management & Business Excellence DOI:
10.1080/14783363.2020.1844564 LicenseCC BY-NC-ND 4.0

- Jouyban, A., Farajzadeh, M. A., Khodadadeian, F., Khoubnasabjafari, M., and Afshar Mogaddam, M. R. (2021): Development of a deep eutectic solvent-based ultrasound-assisted homogenous liquid-liquid microextraction method for simultaneous extraction of daclatasvir and sofosbuvir from urine samples, *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 204, 114254.
<https://doi.org/10.1016/j.jpba.2021.114254>
- Juran, J.M. (1995) *A history of managing for quality: The evolution, trends, and future directions of managing for quality*, ASQC Quality Press Milwaukee, WI.
- Kementerian Kesehatan RI (2020) , *Farmakope Indonesia Edisi VI*,. Jakarta: Kementerian Kesehatan RI.
- Komite Teknis dan ditetapkan oleh Badan Standardisasi Nasional (BSN) Indonesia SNI 19-8402-1991/ISO 8402
- Krieger, E., and Vriend, G. (2014): YASARA View—molecular graphics for all devices—from smartphones to workstations, *Bioinformatics*, 30(20), 2981–2982. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btu426>
- Li, D. (2014). Assessing the impact of interannual variability of precipitation and potential evaporation on evapotranspiration. *Advances in Water Resources*, 70, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2014.04.012>
- Liu, Y., Yang, Y., Zhang, C., Huang, F., Wang, F., Yuan, J., Wang, Z., Li, J., Li, J., Feng, C., Zhang, Z., Wang, L., Peng, L., Chen, L., Qin, Y., Zhao, D., Tan, S., Yin, L., Xu, J., Liu, L. (2020). Clinical and biochemical indexes from 2019-nCoV infected patients linked to viral loads and lung injury. *Science China Life Sciences*, 63(3), 364–374.
<https://doi.org/10.1007/s11427-020-1643-8>
- Lofgreen, J. E., and Ozin, G. A. (2014): Controlling morphology and porosity to improve performance of molecularly imprinted sol-gel silica, *Chemical Society Reviews*, 43(3), 911–933.
<https://doi.org/10.1039/c3cs60276a>

- Maier, J. A., Martinez, C., Kasavajhala, K., Wickstrom, L., Hauser, K. E., & Simmerling, C. (2015). ff14SB: Improving the Accuracy of Protein Side Chain and Backbone Parameters from ff99SB. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 11(8), 3696–3713.
<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00255>
- Maldonado, E., Tao, D., & Mackey, K. (2020). Antithrombotic Therapies in COVID-19 Disease: a Systematic Review. *Journal of General Internal Medicine*, 35(9), 2698–2706. <https://doi.org/10.1007/s11606-020-05906-y>
- Pardeshi, S., and Singh, S. K. (2016): Precipitation polymerization: A versatile tool for preparing molecularly imprinted polymer beads for chromatography applications, *RSC Advances*, 6(28), 23525–23536.
<https://doi.org/10.1039/c6ra02784a>
- Pemerintah Pusat Indonesia, UU kesehatan no 17 tahun 2023, Jakarta
- Peraturan Badan Pengawas Obat Dan Makanan Nomor 7 Tahun 2024 Tentang Standar Cara Pembuatan Obat Yang Baik
- Pichon, V., Delaunay, N., & Combès, A. (2020). Sample Preparation Using Molecularly Imprinted Polymers. *Analytical Chemistry*, 92(1), 16–33. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b04816>
- Piletsky, S. (2006): Molecular Imprinting of Polymers, *Molecular Imprinting of Polymers*. <https://doi.org/10.1201/9781498713542>
- Ruiz-Córdova, G. A., Villa, J. E. L., Khan, S., Picasso, G., and Del Pilar Taboada Sotomayor, M. (2021): Surface molecularly imprinted core-shell nanoparticles and reflectance spectroscopy for direct determination of tartrazine in soft drinks, *Analytica Chimica Acta*, 1159. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338443>
- Saunders RR, Saunders JL. W. Edwards Deming, (1994) Quality analysis, and total behavior management. *Behav Anal.* Spring;17(1):115-25. doi: 10.1007/BF03392656. PMID: 22478176; PMCID: PMC2733706.
- Silva, W. R., Soté, W. O., da Silveira Petrucci, J. F., Batista, A. D., and Junior, M. C. (2022): The use of in silico models for the rationalization of molecularly imprinted polymer synthesis, *European Polymer Journal*, 166. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2022.111024>
- Slamet Ibrahim Surantaatmadja, Peran Analisis dalam Penjaminan dan Pengawasan Mutu Kualitas Obat, Pidato Ilmiah Guru Besar, Bandung.

- Song, X., Li, J., Xu, S., Ying, R., Ma, J., Liao, C., Liu, D., Yu, J., and Chen, L. (2012): Determination of 16 polycyclic aromatic hydrocarbons in seawater using molecularly imprinted solid-phase extraction coupled with gas chromatography-mass spectrometry, *Talanta*, 99, 75–82. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2012.04.065>
- Talento, A. F., and Hoenigl, M. (2020): Fungal Infections Complicating COVID-19: With the Rain Comes the Spores, *Journal of Fungi*. <https://doi.org/10.3390/jof6040279>
- Untung Gunawan, 2024, Sintesis, Karakterisasi, dan Aplikasi Polimer Tercetak Molekul untuk Ekstraksi Beberapa Antijamur Triazol dalam Plasma Darah, Disertasi Program Doktor, Institut Teknologi Bandung.
- Untung Gunawan, Slamet Ibrahim, Atthar Luqman Ivansyah, Sophi Damayanti: “Insights into the selective imprinted polymer of voriconazole from host-guest interaction perspective, *Journal of Molecular Liquids*”, Volume 383, 2023, ISSN 0167-7322, Publisher: Elsevier, Editor: J.M. Valente, H index: 150, Q1, SJR: 0.91 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122130>, <https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-liquids>
- Untung Gunawan, Slamet Ibrahim, Atthar Luqman Ivansyah, Sophi Damayanti: “Separation and analysis of triazole antifungal in biological matrices by liquid chromatography: a review, *Pharmacia*, Volume 70(4), 2023, ISSN: 0428-0296, Publisher: Pensoft Publisher, Editor: Plamen Peikov, H index: 17, Q2, SJR: 0.21 (2022), <https://doi.org/10.3897/pharmacia.70.e111511>, <https://pharmacia.pensoft.net/>
- Villarante, N. R., Bautista, A. P. R., and Sumalapao, D. E. P. (2017): Batch adsorption study and kinetic profile of Cr(VI) using lumbang (*Aleurites moluccana*)-derived activated carbon-chitosan composite crosslinked with epichlorohydrin, *Oriental Journal of Chemistry*, 33(3), 1111–1119. <https://doi.org/10.13005/ojc/330307>
- Vogel, A. (1989) *Vogel's Textbook of Quantitative Chemical Analysis*. Harlow, Essex, England : New York : Longman Scientific & Technical ; Wiley
- Watson D.G. *Pharmaceutical Analysis*, 2nd . ed. Elsevier, Edinburg, 2005

Yan, H., and Kyung, H. R. (2006): Characteristic and synthetic approach of molecularly imprinted polymer, *International Journal of Molecular Sciences*, 7(5-6), 155-178. <https://doi.org/10.3390/i7050155>

UCAPAN TERIMA KASIH

It needs a village, to raise a professor. If you want to go fast, walk alone. If you want to go far, walk together.

Pencapaian sampai titik ini tidak akan lepas dari bantuan dari pihak-pihak yang sangat berperan sebagai berikut:

Ketua Majelis Wali Amanat, Rektor, Para Wakil Rektor dan Sekretaris Institut beserta jajarannya, Ketua dan Anggota Senat, Ketua dan anggota Forum Guru Besar ITB, Para Direktur, Para Ketua UPT, Para Dekanat dan Kaprodi Fakultas/Sekolah, Panitia Orasi Ilmiah.

Sekolah Farmasi

Dekan: Prof. Dr. apt. I Ketut Adnyana; Wakil Dekan Bidang Sumberdaya: Dr. apt. Lia Amalia; Wakil Dekan Bidang Akademik: Prof. Dr. apt. Elfahmi; Ketua Senat: Prof. Dr. Sukrasno, Sekretaris Senat: Dr. Kusnandar Anggadiredja, Ketua Program Studi Sarjana Sains dan Teknologi Farmasi: Dr. rer. nat. Apt. Rachmat Mauludin, M.Si.; Ketua Program Studi Sarjana Farmasi Klinik dan Komunitas: Dr. Apt. Neng Fisheri Kurniati, S.Si., M.Si.; Ketua Program Studi Magister Farmasi, Doktor Farmasi, Magister Farmasi Industri, dan Magister Keolahragaan Prof. Dr. apt. Muhamad Insanu, S.Si., M.Si.; Ketua Program Pendidikan Profesi Apoteker: Dr. apt. Elin Julianti, Dosen Sekolah Farmasi, Kabag, Kasubag dan Jajarannya (Jani Nurhajanti, SIP., MAP.; Neni Nurkumala, SE, apt. Inshe Melori, S.Si., M.S.Farm., Ani Nurani, A.Md., dan Danar Raharja, ST); Tim TPAK Dosen dan Bagian Kepegawaian, Tenaga Kependidikan.

Guru Besar dan Guru Besar Purnabakti Sekolah Farmasi:

Prof. Dr. apt. Andreanus A. Soemardji, Prof. Dr. apt. Asep G. Suganda (alm), Prof. Dr. apt. Debbie S. Retnoningrum (alm), Prof. Dr. apt. Elin Yulinah S., Prof. Dr. apt. Daryono H. Tjahjono, M.Sc., Prof. Dr. apt. Heni Rachmawati, Prof. Dr. apt. Irda Fidrianny, Prof. Dr. apt. Jessie S. Pamudji, Prof. Dr. Kurnia Firman (Alm), Prof. Dr. apt. Komar Ruslan, Prof. Dr. apt. Maria Immaculata Iwo, Prof. Dr. apt. Marlia Singgih W., Prof. Dr. apt. Muhamad Insanu, Prof. Dr. rer.nat. apt. Rahmana Emran Kartasasmita, Prof. Dr. apt. Slamet Ibrahim Surantaatmaja., Prof. Dr. apt. Sukmadajaja Asyarie, Prof. Dr. apt. Sukrasno,

Prof. Dr. apt. Sundani Nurono, Prof. Dr. apt. Yeyet Cahyati S., Prof. Dr. Tommy Apriantono, Prof. Dr. apt. Tutus Gusdinar.

KK Farmakokimia (Dosen, Purnabakti dan Tenaga Kependidikan)

Ketua KK: Prof. Dr. apt. Daryono H. Tjahjono, M.Sc., Prof. Dr. apt. Slamet Ibrahim Surantaatmaja., Prof. Dr. Haryanto Dhanutirto (alm), Prof. Dr. Kurnia Firman (Alm), Prof. Dr. apt. Tutus Gusdinar, Prof. Dr. apt. Marlia Singgih W., Prof. Dr. rer.nat. apt. Rahmana Emran Kartasasmita, Dr. Sardjono Kisman (alm), Dr. Embit Kartadarma (alm); Dr. Sudana Atmawidjaja (alm); Dr. Tatang Hernawan (alm); Dr. Amir Musadad (Alm), Dr. apt. Ilma Nugrahani, Dr. apt. Elin Julianti, Dr. apt. Benny Permana, Dr. apt. Tursino, Dr. apt. Tasia Amelia, Dr. Fransiska Kurniawan, Dr. apt. Yangie Dwi Marga Pinanga, Apt. Andhika Bintang Mahardhika M.Si, Apt. Muhammad Azhari M.Si, Khairiatul Ummah, M.Si, Junaidin, M.Si, Nurhayati, Ani Riani, Alfihis, Zsazsa, Fadhia.

Sekolah Pascasarjana

Dekan: Prof. Dr. Suprijadi; Wakil Dekan Bidang Akademik: Prof. Dr. M.Zaki Mubarak; Kaprodi Magister dan Doktor Sains dan Teknologi Nano: Dr. Nugraha, Koordinator Kerjasama Transisi Energi: Dr. Pipit Fitriyani, Ani Hamidah, M.Ab, Nurita Nindy, S.Ak, Nia Nuraeni, S.Pd., Tenaga Kependidikan.

Pemberi Rekomendasi

Prof. Dr. apt. I Ketut Adnyana, Prof. apt. Daryono Hadi Tjahjono, Ph.D, Prof. rer.nat.apt. Rahmana Emran Kartasasmita, Prof. Dr. apt. Sukrasno, Prof. Dr. apt. Heni Rachmawati, Prof. Yana Maolana Syah (alm.)-FMIPA, Prof. Dr. Bambang Riyanto-STEI, Prof. Dr. Suprijadi-FMIPA, Prof. Dr. apt. Yahdiana Harahap, M.S.-Universitas Indonesia, Prof. Dr. Dra. apt. Aty Widyawaruyanti, M.Si-Universitas Airlangga, Prof. Dr.rer.nat. apt Triana Hertianti-Universitas Gadjah Mada, Indonesia, Prof. Dr. Habibah Nur Wahab-University Sains Malaysia, Prof. Dr. Federico Gago-Alcala University Spanyol, Prof. Dr. Matthias U. Kassack-University of Duesseldorf, Jerman, Prof. Dr. Tomohiko Ohwada-Tokyo University, Jepang

Alumni Pembimbing Utama Program Doktor

Dr. Anjar Hermadi Saputro - Institut Teknologi Sumatra, Dr. Hilda Aprilia - Universitas Islam Bandung, Dr. Engrid Juni Astuti - Universitas Muhammadiyah Malang, Dr. Untung Gunawan - Unika Atmajaya

Alumni dan mahasiswa bimbingan utama/serta dan perwalian sarjana, tesis dan doktor (SDSquad)

Kolaborator

Dosen KK Farmasetika: Dr. apt. Lucy Dewi Nurhajati Sasongko, M.Si.; Prof.Dr. apt. Heni Rachmawati, M.Si.; apt. Tri Suciati, M.Si., Ph.D.; apt. Diky Mudhakhir, S.Si., M.Si., Ph.D.; Dr. apt. Saleh Wikarsa, S.Si., M.Si., DEA.; Dr.rer.nat. apt. Rachmat Mauludin, S.Si. M.Si.; Dr.rer.nat. apt. Catur Riani, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Aluicia Anita Artarini, S.Si., M.Sc.; Dr. apt. Ratna Annisa Utami, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Satrialdi, S.Si., M.Si.; apt. Anindyajati, S.Farm., M.Si.; apt. Annisa Rahma, S.Si., M.Sc.; Dr. apt. Amirah Adlia, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Yuda Prasetya Nugraha, S.Farm., M.Si.; apt. Nur Azizah Fitria, S.Farm., M.Sc.

Dosen KK Farmakologi-Farmasi Klinik: Prof. apt. I Ketut Adnyana., M.Si., Ph.D.; Prof.Dr. apt. Maria Immaculata Iwo, M.Si.; apt. Kusnandar Anggadiredja, S.Si., M.Si., Ph.D.; Dr. apt. Lia Amalia, S.Si., M.Si.; apt. Tomi Hendrayana, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Neng Fisheri Kurniati, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Pratiwi Wikaningtyas, S.Farm., M.Si.; Dr. apt. Afrillia Nuryanti Garmana, S.Si., M.Si.; apt. Dewi Safitri, S.Farm., M.Si., Ph.D.; Dr. apt. Zulfan Zazuli, S.Farm., M.Farm.; Dra. Anis Sussieyani, M.Ds.; apt. Cindra Tri Yuniar, S.Farm., M.Si.; Dr. apt. Tjokorde Istri Armina Padmasawitri, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Siti Farah Rahmawati, S.Farm., M.Si.; Dr. apt. Hubbi Nashrullah Muhammad, S.Farm., M.Si.; Dr. apt. Nova Suliska, S. Farm., M.Si.; apt. Bhekti Pratiwi, S.Farm., M.Si.; apt. Irianti Bahana Maulida Reyaan, S.Farm., M.Si.; apt. Dhyan Kusuma Ayuningtyas, S.Farm., M.Si.

Dosen KK Biologi Farmasi: Prof.Dr. apt. Sukrasno, MS.; Prof.Dr. apt. Irda Fidrianny, M.Si.; Prof.Dr. apt. Elfahmi, S.Si., M.Si.; Prof. Dr. apt. Muhamad Insanu, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Rika Hartati, S.Si., M.Si.; Dr. apt. Hegar Pramastya, S.Si., M.Si.; apt. Defri Rizaldy, S.Farm., M.Si., Ph.D.; Dr. apt. Atina Rizkiya Choirunnisa, S.Farm., M.Si.

Dosen KK Ilmu Keolahragaan: Prof. Drs. Tommy Apriantono, M.Sc., Ph.D.; Dr. Samsul Bahri, M.Kes.; Dr. Rini Syafriani, M.Kes.; Dr. Nia Sri Ramaniam, M.Sc.; Dr. Kusnaedi, M.Pd.; Dr. Didi Sunadi, S.Pd., M.Pd.; Dr. Agung Dwi Juniarsyah, S.Pd., M.Or.; Dr. Muhamad Fahmi Hasan, S.Pd., M.Or.

Tim Pengabdian Masyarakat Kader Kesehatan Sekolah Farmasi: Muhammad Azhari, M.Si, Bhukti Pratiwi, M.Si, Defri Rizaldi, Ph.D; Dr. Agung Dwi Juniarsyah, M.Or.; Sri Indah Ihsani, M.Or; Iwa Ikhwan, M.Or; apt. Khairiatul Ummah; Yangie Dwi Marga Pinanga, Ph.D.

Lintas Fakultas/Sekolah dan Unit: FITB (Prof. Dr. Irwan Meilano, Prof.Dr. Aswan, Dr.rer.nat. Mutiara Rachmat Putri, Dr. Akhmad Riqqi, Dr.Andri Hernandi, Dr. Meli Hadiana), FMIPA-ITB (Prof. Dr. Suprijadi, Prof.Dr. Khairurrijal, Prof. Dr.Intan Detiena Alamsyah, Prof.Dr. M. Ali Zulfikar, Prof. Dr. Lia Djuliawaty, Dr. Hani Garminia, Prof.Dr. Supto Wahyu Indratno, Prof. Dr. Yudi Darma, Dr. Khairul Basar, Dr. Mochamad Iqbal Arifyanto, Dr. Rino Mukti, Dr. Deana Wahyuningrum, Dr. Attar Luqman Ivansyah, Dr. Ikha Magdalena, Dr. rer. nat. Nizar Happyana, Dr. Nurhasan), FSRD ITB (Dr. Alvanov Zpalanzani, Dr. Intan Rizky Mutiaz, Dr. Deden Hendan Durahman, Dr. Deny Willy Junaidy, Mutiara Larasati, M.Ds, Dr. Hafiz Aziz Ahmad, Dr. Aminudin Tua Hamonangan Siregar, Dr.Triyadi Guntur Wiratmo, Dr. Lusia Marlina Nurani), FTMD (Dr. Hermawan Judawisastra, Dr. Arief Hariyanto), FTTM (Prof. Dr.Eng. Ir. Syafrizal, Prof.Dr. Zulfiadi Zulhan, Prof.Dr.Andri Dian Nugraha, Prof.Dr.Nur Heriawan, Dr. Ir. Susanti Alawiyah, M.T., Dr. Setianingsih), FTSL (Dr. Nita Yuanita, Dr. Hadi Kardhana, Dr. Eka Oktariyanto Nugroho, Dr. Emenda Sembiring, Dr. Rani Pradoto Dr. Mochammad Chaerul, Dr. Haryo Satriyo Tomo, Dr. Suharyanto, Dr. Sukandar), FTI (Prof. Brian Yuliarto, Ph.D, Prof. Ari Widyanti Ph.D, Prof.Dr. Yassierli, Dr. Yosi Agustina, Elvi Restiawaty, Ph.D, Dr. Andi Cakravastia Arisaputra Raja, Dr. Anas Maruf, Dr. Dendy Adityawarman, Dr. Suprayogi), SAPPK ITB (Dr.Eng. Puspita Dirgahayani, S.T., M.Eng, Aswin Indraprastha); SBM (Prof.Dr. Reza Nasution (alm), Dr. Yulianto, Dr. Deddy Priatmodjo Koesrindartoto, Dr. Yos Sunitiyoso, Dr. Andika Putra Pratama), SITH (Prof.Dr.Dea Indriani, Dr. Indra Wibowo, Angga Dwiartama, M.Sc, Ph.D, Dr. Dian Rosleine, Dr. Ahmad Faizal, Dr. Intan Taufik), STEI (Prof. Dr. Bambang Riyanto, Dr. Widyawardana Adiprawita, Dr. Agung Wahyu Setiawan, , Dr. Deny Hamdani, Dr. Hamonangan Situmorang Dr. Mohammad Sigit Arifianto, Dr. Tri Desmana Rachmildha, Dr. Umar

Kayam), SPs (Dr. Nugraha, Dr. Triati Dewi Kencana Wungu, Dr. Damar Rastri Adhika), Pusat Unggulan ITB-Artificial Intelligent (Ketua dan Anggota), BIPA (Roslina Sawitri, M.Pd.)

Lintas universitas: Universitas Indonesia (Prof. Dr. Yahdiana Harahap, Dr. Rani Wardani Hakim, Dr. Dwi Anita, Prof.Dr.Arry Yanuar), Universitas Airlangga (Prof. Dr. Dra. apt. Aty Widyawaruyanti, M.Si, Tutik Sri Wahyuni, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt., Adita Ayu Permanasari, S.Si., M.Si), Universitas Gadjah Mada (Prof. Dr.rer.nat. apt Triana Hertianti, Vandy Yoga Swara, M.A), Universitas Padjadjaran (Prof.Dr.Aliya Nurhasanah, Prof.Dr. Ida Musfiroh, Prof. Dr. Muchtaridi, Prof.Dr.Jutti Levita, Dr. Anissa Lestari Kadiyono, M.Psi, Psikolog; Dr. Hermin Aminah Usman, dr. SpPA. SubSp K.A; dan Fury K Fitriyah, SE, M.Ak), Universitas Bengkulu (Dr. dr. Enny Nugraheni Sulistyorini, M.Biomed), Prof.Dr. Enade Istiyastono (Universitas Sanata Dharma), Universitas Mataram (apt. Iman Surya Pratama, M.Si, apt. Eskarani, M.Si), Universitas Pendidikan Indonesia (Tutin Aryanti, Ph.D), UPTD Dinas Kesehatan Pangandaran, apt. Titi Sudiati, M.Si., Universitas Cenderawasih (apt. Nur Fadilah Bakri, S.Si., M.Si).

Internasional: University of Chiang Mai Thailand (Prof.Pract. Supat Jiranusornkul, Dr. Darunee Hongwiset), University Sains Malaysia (Prof. Nurhabibah A Wahab, Dr. Ezatul Ezleen, Dr. Maywan Haryawan-alm), University of Malaya, Malaysia (Assoc.Prof. Vannajan Sanghiran Lee), University Alcalá, Spanyol (Prof.Dr. Federico Gago), University of Tokyo, Jepang (Prof.Dr. Tomohiko Ohwada), University of Duesseldorf, Jerman (Prof. Dr. Matthias U. Kassack, Dr. Alexandra Hamacher, Magdalena Matija, Master and Doctoral Graduate AK.Kassack, Dr. Inne Indriani Diesel, Dr. Arnuf Diesel, University of Bonn (AK Prof. Dr. Wiese, Dr. Stefan Leyers)

Stakeholder: Badan Pengawas Obat dan Makanan, Lembaga Akreditasi Perguruan Tinggi Kesehatan, PT. Paragon Technology and Innovation (apt. Bayu Ahmad Ramdani M.Si), PT. Kalbe Farma (Sri Paryanti, M.Si), PT Imedco (apt. Audrey Clarissa, M.Si), PT. Natur Gondowangi (apt. Michael Hidayat, S.Si)

Komunitas:

Ikatan Alumni SDN Merdeka 1 Bogor, SD Rajawali, SMPN 5 Tanjung Karang, SMAN 2 Tanjung Karang, SMAN 2 Denpasar, IKA Farmasi ITB, IKA ITB93,

FA10793, Sahabat BT Berkah, Perhimpunan Alumni Jerman, Keluarga Indonesia Bonner Doner, Keluarga Indonesia Duesseldorfer, Dosen ITB93, Prajab Kuda Batujajar (ITB, UNPAD, POLBAN dan ISBI), Basket Dosen ITB, Maskers Prajab, Einstein Kids, Jamaah Umroh Salman Oktober 2019, Alumni Rumah Singgah Dosen ITB P45, Run 93 Run, Ars Happy Runners, Xkaprodrunner, Silaturahmi X-Kaprodi, XPilrek, UBG Unit Basket Gosip 90s, UBG Paruh Baya, Tennis ITB, Inti Olahraga Group, Goethe-X, Ibu-ibu Pasar Online, Wanita Sunda Antar Benua, Geng Bagor CCAR, Girlsrazi, 4an Kada, GBFit, Semut Merah Kaizen, Let's Go Trip, Warga Adipura dan Setiabudi Regency.

Keluarga

Keluarga Besar dari: Bapak O. Suherman dan Ibu Omah (alm), Ibu Henny Yuhaeni., Ibu Yoyoh (alm), Bapak Sukinta (alm), Bapak G. Makboel (alm), Ibu Nenden Marfuah (alm), Bapak Hamid Irawan (alm), Ibu. Nenden Dananingsih (alm), Bapak Ismet Koswara, Bapak Kusman, dr. Trimayu Sukandar, Sp.B, Bani Kusumo.

Saudara kandung, ipar, dan ponakan: Renata Susanti, Muhammad Rayhan Fadhilah, Raysha Auliya Fadhiya, Arie Irwan Armansyah,`Desi Annisaa Kusumawati, Khansa Auliya Virrsyani, Hayfa Amalia Firasyani, Al Jundan Rabbani, Al Khalid Ghifari, Al Zayd Raffaza, Dhani Putra Perdana, Ria Anggraini, Thalita Aulia Putri, Maudy Athalia Putri.

Saudara ipar dan ponakan Bani Djam'an: Ahmad Yani, Cariah, M. Haryono, Dewi Madureni, Bagas Chandra Permana, Nadja Fathurannisa, Tommy Junaidi, Sri Hidayati, Muhammad Omida Affif, Hemi, Muhammad Omida Aziz, Agung Priyambodo, Maya Meilina, Labib Alfaruqi Ibrahim, Azalia Salsabila Khasanah, Dzaki Taufiiqul Hakim, Muhammad Adib Diponegoro, Rosiisah Akhlaaqul Kariimah, Faaiz Abdul Kariim, Teguh Rahmanto, Octarina, Muhammad Irfan, Ichsan Falah, Iqbal Alfarizki.

Almarhum Ayahanda Bapak Djam'an dan almarhumah Ibunda Mertua Ibu Marwinah yang tidak dapat kami hadirinya karena kami masih di negeri seberang. Terima kasih telah melahirkan putranya yang menjadi pendamping saya sampai sekarang.

Ibunda tercinta, Ibu Dedeh Dahlia yang dengan perhatian dan kecemasannya mengantarkan kami anak-anaknya berkarya dan selalu mencontohkan pentingnya berbagi kepada sesama.

Almarhum ayahanda tercinta, yang telah menghadap Sang Pencipta pada hari Jumat 16 Juni 2000, Bapak Daday Sulaeman tersayang, yang mengenalkan kami akan kesukaan membaca buku, yang menurunkan hobby menulis dan pernah berkata “Ophi sepertinya nanti akan sering melanglang buana” yang di kemudian hari menjadi ucapan adalah doa. Sayangnya Bapak tidak sempat menyaksikannya. Semoga Allah Swt. menempatkan ayahanda di tempat yang terbaik.

Suami tercinta M. Bayu Nurwicaksono, yang selalu sabar dan setia menghadapi istrinya yang “random”. Selalu (berusaha) terbiasa (sambil geleng-geleng kepala dan menepuk dahi) dengan kejutan berbagai kejadian yang menimpa istrinya yang *clumsy*. Suami yang sebenarnya lebih cerewet dan silet dibanding istrinya. Ikan hiu geter geter, *I love you more than ever*.

Allah Swt. atas segala nikmat, karunia dan rejeki yang telah diberikan.

CURRICULUM VITAE



Nama : Sophi Damayanti
Tempat/tgl lahir : Bandung, 20 Februari 1975
Kel. Keahlian : Farmakokimia/Sekolah Farmasi
Alamat Kantor : Labtek VII Jalan Ganesha 10,
Bandung
Nama Suami : M. Bayu Nurwicaksono
Nama Anak : M. Farrel Radityo (alm.)

I. RIWAYAT PENDIDIKAN

- 1980-1981 TK Al Ghazali Bogor, Jawa Barat
- 1981-1983 SDN Merdeka Bogor, Jawa Barat
- 1983-1987 SD Rajawali, Banjarmasin, Kalimantan Selatan
- 1987-1990 SMPN 5 Tanjung Karang, Bandar Lampung, Lampung
- 1990-1991 SMAN 2 Tanjung Karang, Bandar Lampung, Lampung
- 1991-1993 SMAN 2 Denpasar, Bali
- 1993-1997 Sarjana Departemen Farmasi, FMIPA, Institut Teknologi Bandung
- 1997-1998 Apoteker Departemen Farmasi, FMIPA, Institut Teknologi Bandung
- 2000-2002 Magister Departemen Farmasi, FMIPA, Institut Teknologi Bandung (Cum Laude)
- 2005-2006 University of Bonn, Germany (Research Group: Prof. Matthias U. Kassack)-Doctoral Program in Pharmacy-Pharmaceutical and Medicinal Chemistry
- 2007-2008 University of Duesseldorf, Germany (Research Group: Prof. Matthias U. Kassack)- Doctoral Program in Pharmacy-Pharmaceutical and Medicinal Chemistry (continued) Dr.rer.nat

II. RIWAYAT KERJA

- Juni 2024-sekarang (Wakil Dekan Bidang Sumber Daya Sekolah Pasca Sarjana ITB)

- Juni 2022-Juni 2024 (Wakil Dekan Bidang Sumber Daya Sekolah Pasca Sarjana ITB)
- Juni 2020-Juni 2022 (Wakil Dekan Bidang Sumber Daya Sekolah Pasca Sarjana ITB)
- Jan 2018- Mei 2020 (Ketua Program Studi Profesi Apoteker)
- Juli 2015- Des 2017 (Ketua Program Studi Sarjana Farmasi Klinik dan Komunitas)
- 2013-2015 (Koordinator Kelas International)
- 2010-sekarang (PNS ITB)
- 2009 (CPNS ITB)
- 1999-2009 (Asisten Akademik Departemen Farmasi ITB)
- Maret 1999-September (PT. Bristoll Meyers Squib)

III. RIWAYAT KEPANGKATAN

1	Pembina Tingkat I IV/b	03 April 2024
2	Pembina IV/a	11 April 2019
3	Penata Tingkat I III/d	23 Mei 2017
4	Penata III/c	31 Maret 2010

IV. RIWAYAT JABATAN FUNGSIONAL

1	Guru Besar	1 Agustus 2023
2	Lektor Kepala	1 September 2016
3	Lektor	1 Februari 2011

V. JUMLAH LULUSAN

Pembimbing utama/serta: Sarjana 116, Magister 38, Doktor 11

VI. PERKULIAHAN

- **Program Sarjana:** Farmasi Lingkungan, Kimia Medisinal, Praktikum Kimia Farmasi Organik dan Fisik, Praktikum Kimia Farmasi Analisis, Dasar Analisis Farmasi, Kimia Analisis Farmasi, Analisis dan Keamanan Pangan, Analisis Farmasi Instrumental, Praktikum Kimia Farmasi Instrumen dan Biokimia
- **Program Profesi Apoteker:** Distribusi Rantai Pasok
- **Program Pascasarjana:** Analisis Kosmetik dan PKRT, Metode Analisis Fisikokimia, Pemisahan Analitik, Desain Obat Berbasis Komputasi,

Evaluasi Analisis dan Keamanan Pangan, Regulasi dan Etika Farmasi, Perkembangan Terkini Analisis Farmasi, Doping dalam Olahraga.

VII. PENELITIAN

2024

1. Pengembangan dan Validasi Metode Analisis Artemisinin pada Dried Blood Spot (DBS) dengan Kromatografi Cair - Spektrometri Massa (LC-MS)- P2MI 2024-Leader
2. Eksplorasi Potensi Bahan Komposit Berbasis Biopolimer/GO Sebagai Target Sistem Penghantaran Obat Dalam Terapi Kanker, Program Penelitian Internasional ITB, Anggota
3. Pengembangan Centella asiatica sebagai Radioprotector, Penelitian Kolaborasi, Hibah Kementerian Pendidikan dan Kebudayaan - Anggota
4. Sintesis Senyawa Turunan Calkon dengan Konsep Green Chemistry Menggunakan Metode MAOS (Microwave Assisted Organic Synthesis) dalam Cairan Ionik Sedang (Ionic Liquids) dan Kajian Potensial Sebagai Obat Antipsikotik oleh Hibah Penelitian di Silico-ITB - Anggota

2023

1. Uji Toksisitas dan Pengembangan Beberapa Senyawa Aktif dari Bahan Alam sebagai Hepatitis C Antivirus (HCV) secara In Silico dan In Vitro – P2MI ITB – Ketua
2. Sintesis Beberapa Senyawa "Active Pharmaceutical Ingredient" (API) Dalam Medium Cairan Ion ("Ionic Liquids") Beserta Simulasi Bioaktivitasnya Secara In Silico" - Riset PDUPT Dikti – Anggota
3. Sintesis, Karakterisasi Molecularly Imprinted Polymer serta Aplikasinya untuk Analisis Enoksaparin dalam Plasma Darah- Riset PDUPT Dikti – Ketua

2022

1. Studi In Silico dan Pengembangan Metode Analisis Penentuan Bahan Alam sebagai Anti Hepatitis C (Ketua) – P2MI ITB - Ketua
2. Sintesis Beberapa Senyawa "Active Pharmaceutical Ingredient" (API) Dalam Medium Cairan Ion ("Ionic Liquids") Beserta Simulasi Bioaktivitasnya Secara In Silico" - Riset PDUPT Dikti - Anggota

3. Pengembangan MIP untuk Analisis Obat Antikoagulan Enoksaparin-Riset ITB - Ketua

2021

- Studi In Silico dan Pengembangan Metode Analisis Penentuan Bahan Alam sebagai Anti Hepatitis C (Ketua)-P2MI ITB-Ketua

2020

1. Senyawa Turunan Porphirin sebagai Kit Radiofarmaka untuk Diagnostik dan Terapi Kanker – Riset Menteri Pendidikan dan Kebudayaan – Anggota
2. Optimasi Fermentasi Kultur Kombucha pada Ekstrak Air Biji Kopi Hijau Robusta (*Coffea cenephora*) sebagai Penurun Berat Badan - Riset PDUPT Dikti - Anggota
3. Sintesa dan Karakterisasi MIP sebagai Adsorbent untuk Pemurnian dan Isolasi Andrografolid - PDUPT Menteri Pendidikan dan Kebudayaan - Anggota

2019

1. Sintesa dan Karakterisasi MIP sebagai Adsorbent untuk Pemurnian dan Isolasi Andrografolid -P3MI ITB-Anggota
2. Senyawa Turunan Porphirin sebagai Kit Radiofarmaka untuk Diagnostik dan Terapi Kanker – Riset Dikti - Anggota
3. Optimasi Fermentasi Kultur Kombucha pada Ekstrak Air Biji Kopi Hijau Robusta (*Coffea cenephora*) sebagai Penurun Berat Badan - Riset PDUPT Dikti - Anggota
4. Pengembangan biokonjugat berbagai senyawa obat poten menggunakan subunit ringan tirosinase jamur rekombinan dari jamur kancing (*Agaricus bisporus*) untuk pemberian obat oral dan kajian mekanisme kerjanya secara *in vitro*, *ex vivo* dan *in vivo* – Riset Dikti – Anggota
5. Sintesis Senyawa Turunan Flavon dari Calkon Menggunakan Media Cairan Ion dengan Metode Microwave Assisted Organic Synthesis (MAOS) serta Analisis Farmakokimianya Riset PDUPT Dikti – Anggota

2017

- Pengembangan Ekstrak Bawang Tiwai (*Eleutherine Americana Merr.*) Sebagai Kandidat Bahan Tambahan Pangan (BTP) Pengawet Alami : Analisis Secara Molekular, In Silico Dan In Vivo-Riset Dikti-Ketua

2016

- Aktivitas Antifibrotik dan Studi Toksisitas In Ovo Nanopartikel Curcumin-Emas Bertarget Hati-Riset ITB-Anggota

VIII. PENGABDIAN MASYARAKAT

- **2024** Penggunaan Obat Tradisional dan Keamanan Pangan yang Aman sebagai Pondasi Pengetahuan Masyarakat Jayapura, Papua melalui Pelatihan Kader Kesehatan
- **2023** Peningkatan Kapasitas Kader Kesehatan Berbasis Kemitraan Apoteker dalam Keamanan Penggunaan Obat Tradisional dan Kosmetik di Lombok Barat, Provinsi Nusa Tenggara Barat - Hibah PKM ITB - Ketua
- **2022:** Peningkatan Kapasitas Kader Berbasis Kemitraan Apoteker dalam Penggunaan Obat Secara Rasional dan Keamanan Pangan di Kota Mataram Provinsi Nusa Tenggara Barat - Hibah PKM ITB - Ketua
- **2021** Peningkatan Kapasitas Kader Berbasis Kemitraan Apoteker dalam Penggunaan Obat Suplemen dan Keamanan Kosmetik di Pangandaran, Jawa Barat - Hibah PKM ITB - Ketua
- **2020:** Peningkatan Kapasitas Kader Berbasis Kemitraan Apoteker dalam Penggunaan Obat Secara Rasional dan Keamanan Pangan di Pangandaran, Jawa Barat - Hibah PKM ITB - Ketua
- **2019:** Peningkatan Peran Apoteker Di Pos Yandu Untuk Pengobatan Mandiri Di Cibodas Lembang - Hibah Pkm P3mi Itb - Ketua
- **2018:** Peningkatan Peran Apoteker Di Pos Yandu Untuk Pengobatan Mandiri Di Cibodas Lembang - Hibah Pkm Itb – Ketua

IX. INVITED SPEAKER

1. *Invited Speaker*, Iccst 7, The Role Of Computational Chemistry In Developing Molecular Imprinted Polymer For Separation Method, Malaysia, 2023

2. Narasumber Pelatihan Di Badan Pengawas Obat Dan Makanan, Jakarta And Bandung-Sekarang
3. Pembicara Webinar: Ai In Drug Discovery, Pusat Ai Itb, Daring, 2021
4. *Invited Speaker*: Computer Aided Drug Design 2018: Toxicity And Interaction Study Of Several Natural Compounds For Antiviral And Antibacterial Activity, Universitas Udayana, Denpasar Bali, 26-30 November 2018
5. *Guest Lecture*: Mengenal Bahan Berbahaya Yang Disalahgunakan Dalam Kosmetik And Cara Memilih Kosmetik Yang Paguyuban Sappk Itb, 24 Maret 2017
6. Studium Generale Farmasi Dan Dunia Kerja, 16 September 2017, Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia
7. *Invited Speaker*, Seminar National Aptfi: Aplikasi Penggunaan Kimia Komputasi Untuk Prediksi Toksisitas, 17-18 November 2017, Universitas Lambung Mangkurat, Banjarmasin, Kalimantan Selatan
8. *Invited Speaker* Pelatihan Di Pt. Dipa Pharmalab, Bandung, Indonesia Until 2017
9. *Invited Speaker*: Computer Aided Drug Design 2015: Application Of Computational Method For Predicting Toxicity Of Compound In Food And Drug Research, Universiti Sains Malaysia, Penang Malaysia, 8-10 Desember 2015
10. *Guest Lecture*: Topics Of Pharmacochemistry Research Group, School Of Pharmacy Itb Keio University, Tokyo, Jepang, 2 Oktober 2013

X. MITRA BESTARI

1. Narasumber Badan Pengawas Obat dan Makanan
2. Penguji Sidang Doktor Seoul National University, 2023, Universitas Padjajaran 2023, 2024
3. Asesor Nasional Lembaga Akreditasi PT Kesehatan (LAMPTKES) 2014-sekarang
4. Asesor Sertifikasi Dosen 2015 -sekarang
5. Asesor Beban Kerja Dosen: 2022-sekarang
6. Editor Acta Pharmaceutica Indonesia 2022-sekarang
7. Reviewer Jurnal Nasional dan Internasional

XI. JURNAL NASIONAL

1. **Sophi Damayanti**, Vanya Maharani, Marlia Singgih, Benny Permana, Andhika B Mahardika, Defri Rizaldi, Rika Hartati, Indra Wibowo: "Ethanolic *Sisyrinchium palmifolium* L. Extract as Natural Preservative for Indonesian Tofu Preparation, Ekstrak Etanol *Sisyrinchium palmifolium* L. sebagai Pengawet Alami untuk Olahan Tahu Indonesia", *Pharmacy: Jurnal Framasi Indonesia*, Volume 19, No. 1, Juli 2022, pages 1-9, eISSN : 2579-910X, Publisher: Fakultas Farmasi Universitas Muhammadiyah Purwokerto, Editor : Suparman, Akreditasi No.23/E/KPT/2019 (SINTA 3), <https://dx.doi.org/10.30595/pharmacy.v19i1.8691>
2. Wanti Megawati, **Sophi Damayanti**: "Analytical Method Development of Content and Dissolution Assay of Ursodeoxycholic Acid Capsule", *Indonesian Journal of Pharmaceutical Science and Technology*, Vol 8, No 3 (2021), pages 96-105, ISSN: 2406-856X, Publisher: Universitas Padjadjaran, Sinta 2, Akreditasi No. 36/E/KPT/2019, <https://doi.org/10.24198/ijpst.v8i3.31420>, <https://jurnal.unpad.ac.id/ijpst/index>
3. Kusnandar Anggadiredja, Triantri Kartika Putri, **Sophi Damayanti**: "Potensi Ketergantungan Mahasiswa Terhadap Konsumsi Minuman Berenergi", *Jurnal Sains Keolahragaan dan Kesehatan*, Vol.6, No.1, 2021, p47-60, ISSN: 26548860, Publisher: Sekolah Farmasi Institut Teknologi Bandung, <https://journals.itb.ac.id/index.php/jskk/article/view/16594> ; <http://journals.itb.ac.id/index.php/jskk/index> ; Sinta 4, Akreditasi No. 200 / M / KPT / 2020, <https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=7079>
4. Hariyanti, **Sophi Damayanti**, Sasanti Tarini: "Optimasi Proses Pembuatan dan Karakterisasi Fisik Niosom Sinkonin", *PHARMACY: Jurnal Farmasi Indonesia* Vol 16, No 2, Desember 2019, p178-187, pISSN:1693-3591, eISSN:2579-910X, Publisher: Fakultas Farmasi Universitas Muhammadiyah Purwokerto, Sinta 3, Akreditasi No.23/E/KPT/2019, DOI: 10.30595/pharmacy.v16i2.5841; <http://jurnalnasional.ump.ac.id/index.php/PHARMACY/index>; <https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=237>
5. Elin Julianti, Mochamad Fathurohman, **Sophi Damayanti**, Rahmana Emran Kartasasmita: "Isolate Of Heterotrophic Microalgae As A Potential Source For Docohexaenoic Acid (DHA)", *Marine Research in Indonesia* Vol.43, No.2 (2018), p79-84, ISSN: 0216-2873 (print) and 2443-2008 (online),

- Akreditasi No.21/E/KPT/2018, Sinta 2, Publisher: Research Center for Oceanography-Indonesian Institute of Sciences (LIPI),
<https://doi.org/10.14203/mri.v43i2.264> ,
<https://mri.lipi.go.id/index.php/MRI/index> , H index 17,
<https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=3101>
6. Saeful Amin, **Sophi Damayanti**, Slamet Ibrahim: "Synthesis and Characterization *Molecularly Imprinted Polymer* for Analysis of Dimethylamylamine Using Acrylamide as Monomer Functional", Jurnal Kefarmasian Indonesia Vol 8 No. 2 Tahun 2018, p76-84, eISSN : 2354-8770 | pISSN : 2085-675X, Akreditasi No. 21 / E / KPT / 2018, 9 Juli 2018, Sinta 2, Publisher: Badan Penelitian dan Pengembangan Kesehatan Kementerian Kesehatan RI,
<https://doi.org/10.22435/jki.v8i2.330>,
<https://ejournal2.litbang.kemkes.go.id/index.php/jki/index> ,
H index 12, <https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=2785>
 7. **Sophi Damayanti**, Eko Prayitno, Farel Fhahrizal, Adi Suwandi: "Penentuan Kadar ZNO dalam Bedak Wajah Menggunakan Spektroskopi Serapan Atom", Acta Pharmaceutica Indonesia Vol.43, No.1, 2018, p1-6, ISSN: 0216-616X, Publisher: Sekolah Farmasi Institut Teknologi Bandung, <http://journals.itb.ac.id/index.php/acta/article/view/6320>
 8. Marlia Singgih, Kanaka L. Ahsogan, Irma M. Puspitasari, **Sophi Damayanti**: "Lactobacillus plantarum as Biopreservative Agent in Paneer for Dietary Food of Diabetic and Coronary Heart Disease Patients", Indonesian Journal of Clinical Pharmacy, Vol.6. Issue.1, 2017, p38-45, ISSN:2252-6218, , Publisher: Program Magister Farmasi Klinik, Universitas Padjadjaran,
<http://jurnal.unpad.ac.id/ijcp/article/view/15386>,
<http://jurnal.unpad.ac.id/ijcp/index> , H index 10, Sinta 2, Akreditasi No. 212/P/2014, <https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=773>
 9. Framesti Frisma Sriarumtias, Sasanti Tarini Darijanto, **Sophi Damayanti**: "Formulasi Dan Uji Potensi Antioksidan Nanostructured Lipid Carrier (Nlc) Retinil Palmitat", Acta Pharmaceutica Indonesia, Vol.42, No.1, 2017, p25-31, ISSN: 0216-616X, Publisher: Sekolah Farmasi Institut Teknologi Bandung,
<http://journals.itb.ac.id/index.php/acta/article/view/4563>,
<http://journals.itb.ac.id/index.php/acta/index>

10. **Sophi Damayanti**, Low Sin Ee, Slamet Ibrahim: "Verifikasi Metode Dan Penentuan Kadar Laktosa Dalam Sampel Susu Yang Berperisa Menggunakan Kromatografi Cair Kinerja Tinggi", *Jurnal Sains Keolahragaan dan Kesehatan* Vol 4, No 1 (2019), p11-14, P-ISSN: 2477-1791 E-ISSN: 2654-8860, Publisher: Kelompok Keilmuan Olahraga, Sekolah Farmasi ITB,
<http://dx.doi.org/10.5614%2Fjskk.2019.4.1.2>,
<http://journals.itb.ac.id/index.php/jskk/index> ,
 H index 3, Sinta 4, SK Akreditasi No. 200/M/KPT/2020,
<https://www.sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=7079>
11. Saeful Amin, **Sophi Damayanti**, Slamet Ibrahim: "Interaction Study, Synthesis and Characterization of Molecular Imprinted Polymer Using Functional Monomer Methacrylate Acid and Dimethylamylamine as Template Molecule", *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia* Vol.16, No.1, (2018), p12-19, p-ISSN 1693-1831 (Print) e-ISSN 2614-6495 (Online), Akreditasi No.36 / E / KPT / 2019, 13 Desember 2019, Sinta 2, Publisher: Fakultas Farmasi Universitas Pancasila,
<https://doi.org/10.35814/jifi.v16i1.430>;
<http://jifi.farmasi.univpancasila.ac.id/index.php/jifi/index> ,
 H index 15, <https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=743>

XII. JURNAL INTERNASIONAL (Sejak 2016-LK)

1. Untung Gunawan, Slamet Ibrahim, Atthar Luqman Ivansyah, Sophi Damayanti, Unraveling multi-template molecularly imprinted polymer for selective extraction of triazole antifungals: Theoretical and experimental investigation, *Reactive and Functional Polymers*. DOI 10.1016/j.reactfunctpolym.2024.105915
2. Engrid Juni Astuti, Benny Permana, Slamet Ibrahim, Muhammad Ali Zulfikar, **Sophi Damayanti**, In silico and experimental study of functionalized monomer for molecularly imprinted-enoxaparin polymer: A novel green approach, *Reactive and Functional Polymers*. DOI 10.1016/j.reactfunctpolym.2023.105778
3. Hilda Aprilia Wisnuwardhani, Slamet Ibrahim, Rino R. Mukti, **Sophi Damayanti**: "Study on monomer functional suitability toward sofosbuvir in molecularly imprinted polymer: In silico and experimental study", *Composites part C: Open Access*, Volume 12, October 2023, ISSN:2666-6820, Publisher: Elsevier B.V., Editor: Prof. Antonio J. M. Ferreira, Ph.D, H index: 16, Q2, SJR: 0,699 (2022),

- <https://doi.org/10.1016/j.jcomc.2023.100405>,
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666682023000610>
4. Anjar Hermadi Saputro, Tasia Amelia, Andhika Bintang Mahardhika, Aty Widyawaruyanti, Tutik Sri Wahyuni, Adita Ayu Permanasari, Aluicia Anita Artarini, Daryono Hadi Tjahjono, Sophi Damayanti: "Alpha-mangostin, piperine and beta-sitosterol as hepatitis C antivirus (HCV): In silico and in vitro studies", *Heliyon* Volume 9, Issue 9, ISSN: 2405-8440, Publisher: Cell Press Elsevier, Editor: Prof. Francesco Epifano, H index 69, Q1, SJR 0,61 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e20141>
 5. Untung Gunawan, Slamet Ibrahim, Atthar Luqman Ivansyah, **Sophi Damayanti**: "Insights into the selective imprinted polymer of voriconazole from host-guest interaction perspective, *Journal of Molecular Liquids*", Volume 383, 2023, ISSN 0167-7322, Publisher: Elsevier, Editor: J.M. Valente, H index: 150, Q1, SJR: 0.91 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122130>,
<https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-molecular-liquids>
 6. Untung Gunawan, Slamet Ibrahim, Atthar Luqman Ivansyah, **Sophi Damayanti**: "Separation and analysis of triazole antifungal in biological matrices by liquid chromatography: a review, *Pharmacia*, Volume 70(4), 2023, ISSN: 0428-0296, Publisher: Pensoft Publisher, Editor: Plamen Peikov, H index: 17, Q2, SJR: 0.21 (2022), <https://doi.org/10.3897/pharmacia.70.e111511>,
<https://pharmacia.pensoft.net/>
 7. Hilda Aprilia Wisnuwardhani, Slamet Ibrahim, Rino R. Mukti, **Sophi Damayanti** : "Molecularly-Imprinted SERS: A Potential Method for Bioanalysis", *Scientia Pharmaceutica*, Volume 90, Issue 3, 2022, Artikel 54, ISSN: 2218-0532, Publisher: MDPI AG, Editor: Prof. Dr. Helmut Viernstein, H index 46, Q2, SJR 0,547 (2021), <https://www.mdpi.com/2218-0532/90/3/54> , <https://www.mdpi.com/journal/scipharm>
 8. Anjar Hermadi Saputro, Aluicia Anita Artarini, Daryono Hadi Tjahjono, **Sophi Damayanti**: "The long and stumble way to find potential active compounds from plants for defeating hepatitis B and C: review", *Pharmacia*, Volume 69, Issue 3, 2022, pages 699-708, ISSN: 0428-0296, Publisher: Pensoft Publishers, Editor: Plamen Peikov, H index 16, Q3, SJR 0,166 (2021),
<https://doi.org/10.3897/pharmacia.69.e85160> ,
<https://pharmacia.pensoft.net>
 9. Khonsa, Dwi Larasati Setyaningrum, Anjar Hermadi Saputro, Tasia Amelia, Slamet Ibrahim, **Sophi Damayanti**: "Analysis of β -Sitosterol in Supplement Using High-Performance Liquid Chromatography Development And Validation", *Rasayan Journal of Chemistry* Vol 15, No 3,

- July-September 2022, p1997-2003, ISSN: 0974-1496, Publisher: Rasayan Journal,
<https://doi.org/10.31788/RJC.2022.1536752> ;
<https://rasayanjournal.co.in/index.php> ; H index 20, Q2, SJR 0,333 (2021) ;
<https://www.scopus.com/sourceid/19400157518>
10. Wiwin Winingsih, Slamet Ibrahim, **Sophi Damayanti** : "Purification of Andrographolide Methanolic Extract Using Molecularly Imprinted Polymer Prepared by Precipitation Polymerization", *Scientia Pharmaceutica*, Volume 90, Issue 2, 2022, Artikel 27, ISSN: 2218-0532, Publisher: MDPI AG, Editor: Prof. Dr. Helmut Viernstein, H index 46, Q2, SJR 0,547 (2021), <https://www.mdpi.com/2218-0532/90/3/54>,
<https://www.mdpi.com/journal/scipharm>
 11. Tursino, Elin Julianti, Tutus Gusdinar, **Sophi Damayanti**: "C-Phycocyanin From *Spirulina platensis* as A Substrate Candidate for Protease Activity Assay of Pancreatin: Isolation, Characterization and Kinetic Assay", *Rasayan Journal of Chemistry Vol 15, No 1, January-March 2022*, p369-376, ISSN: 0974-1496, Publisher: Rasayan Journal,
<https://doi.org/10.31788/RJC.2022.1516601> ;
<https://rasayanjournal.co.in/index.php> ; H index 20, Q2, SJR 0,333 (2021) ;
<https://www.scopus.com/sourceid/19400157518>
 12. Wiwin Winingsih, Slamet Ibrahim, **Sophi Damayanti**: "Development of Molecularly Imprinted Polymer Microspheres Made by Surface Imprinting for Purification of Andrographolide", *Rasayan Journal of Chemistry Vol 15, No 2, April-June 2022*, p1296-1305, ISSN: 0974-1496, Publisher: Rasayan Journal,
<https://doi.org/10.31788/RJC.2022.1526900> ;
<https://rasayanjournal.co.in/index.php> ; H index 20, Q2, SJR 0,333 (2021) ;
<https://www.scopus.com/sourceid/19400157518>
 13. **Sophi Damayanti**, D. Puspaningrum, Hubbi Nasrullah Muhammad, Tasia Amelia, Benny Permana, Rika Hartati, Indra Wibowo: "Interactions of The Chemical Constituents of *Eleutherine americana* (AUBL.) Merr. Ex. K. Heyne With Cyclooxygenase and H5N1 Rna Polymerase: An In silico Study" *Rasayan Journal of Chemistry Vol 14, No 2, April-June 2021*, p844-854, ISSN: 0974-1496, Publisher: Rasayan Journal,
<http://dx.doi.org/10.31788/RJC.2021.1426117> ;
<https://rasayanjournal.co.in/index.php> ; H index 20, Q2, SJR 0,265 ;
<https://www.scopus.com/sourceid/19400157518>
 14. **Sophi Damayanti**, Nabilla Rizkia Fabelle, Wipawadee Yooiin, Muhamad Insanu, Supat Jiranusornkul, Pathomwat Wongrattanakamon: "Molecular Modeling for Potential Cathepsin L. Inhibitor Identification as New Anti-Photoaging Agents from Tropical Medicinal Plants", *Journal of*

- Bioenergetics and Biomembranes Vol.53, Issue.2, April 2021, ISSN:15736881, Publisher: Springer New York, <https://doi.org/10.1007/s10863-021-09893-5>; <https://www.springer.com/journal/10863> ; H index 94, Q2 (2019), SJR 0,909 (2019), <https://www.scopus.com/sourceid/17590>
15. **Sophi Damayanti**, Khonsa Khonsa, Tasia Amelia: "Antiviral Activity and Toxicity Prediction of Compounds Contained in Figs (*Ficus carica* L.) by In Silico Method", Indonesian Journal of Pharmaceutical Science and Technology Vol 8, No 1 (2021), p21-33, ISSN:2406856X, Publisher: Fakultas Farmasi Universitas Padjadjaran, Sinta 2, Akreditasi No.36/E/KPT/2019, <https://doi.org/10.24198/ijpst.v8i1.29868> ; <http://jurnal.unpad.ac.id/ijpst/index> ; H index 8, <https://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=3509>
 16. **Sophi Damayanti**, Samuel Gunadi Tanusondjaja, Benny Permana, Rika Hartati, Dian Ayu Eka Pitaloka, Indra Wibowo: "Simple Method of 9,10-Anthraquinone Assay in *Eleutherine americana* (Aubl.) Merr. ex K. Heyne using High-Performance Liquid Chromatography", Indonesian Journal of Chemistry, Volume 21, No. 6, 2021, p1389-1396, ISSN:1411-9420, Publisher: Chemistry Department Universitas Gajah Mada, (RISTEK-BRIN) No.: 85/M/KPT/2020, H Index 14, Q3, SJR 0,273, <https://doi.org/10.22146/ijc.64701> ; <https://jurnal.ugm.ac.id/ijc/index>
 17. Ni Made Pitri Susanti, **Sophi Damayanti**, Rahmana Emran Kartasasmita, Daryono Hadi Tjahjono: "A Search for Cyclin-Dependent Kinase 4/6 Inhibitors by Pharmacophore-Based Virtual Screening, Molecular Docking, and Molecular Dynamic Simulations", International Journal of Molecular Sciences, Volume 22, Issue 24, Dec 2021, 13423, ISSN: 1422-0067, Publisher: MDPI Multidisciplinary Digital Publishing Institute, <https://doi.org/10.3390/ijms222413423>; <https://www.mdpi.com/journal/ijms> ; H Index 162, Q1, SJR 1,455 ; <https://www.scopus.com/sourceid/25879>
 18. Wiwiet Yuniati, Tasia Amelia, Slamet Ibrahim, **Sophi Damayanti**: "Analytical Method Development for Determining Formaldehyde in Cream Cosmetics Using Hyphenated Gas Chromatography", ACS Omega, Volume 6, Issue 42, Pages 27600-28454, ISSN: 2470-1343, Publisher: American Chemical Society, <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c04792> , <https://pubs.acs.org/journal/acsodf> , H Index 40, Q1, SJR 0,779, <https://www.scopus.com/sourceid/21100828963>
 19. Hubbi Nashrullah Muhammad, **Sophi Damayanti**, Daryono Hadi Tjahjono: "Porphyrin-acridine Hybrid Compounds as Potential Candidates for Topoisomerase II Alpha Inhibitors", Chiang Mai Journal of Science Vol.47, No.3, May 2020, p455-472, ISSN:01252526, Publisher: Chiang Mai University,

- https://epg.science.cmu.ac.th/ejournal/journalDetail.php?journal_id=10917 , <https://epg.science.cmu.ac.th/ejournal/index.php> , H index 18, Q4, SJR 0.148, <https://www.scopus.com/sourceid/1780015670>
20. **Sophi Damayanti**, Nadiyah Athifah Salim Martak, Benny Permana, Adi Suwandi, Rika Hartati, Indra Wibowo: "In Silico Study on Interaction and Preliminary Toxicity Prediction of Eleutherine americana Components as an Antifungal and Antitoxoplasmosis Candidate", Indonesian Journal of Chemistry Vol 20, No 4 (2020), p899-910, ISSN:14119420, Akreditasi No.85/M/KPT/2020, Publisher: Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Gadjah Mada, <https://doi.org/10.22146/ijc.48570> , <https://jurnal.ugm.ac.id/ijc/> , H index 24, Q3, SJR 0.242, <https://www.scopus.com/sourceid/21100223536>
 21. Dian Ayu Eka Pitaloka, Andrea M. Cooper, Aluicia Anita Artarini, **Sophi Damayanti**, Elin Yulinah Sukandar, : "Regulation Of Mitogen-Activated Protein Kinase Signaling Pathway And Proinflammatory Cytokines By Ursolic Acid In Murine Macrophages Infected With Mycobacterium Avium", Infectious Disease Reports Vol. 12 No. s1 (2020), p5-10, ISSN: 20367449, Publisher: PagePress Publications, <https://doi.org/10.4081/idr.2020.8717>, <https://www.pagepress.org/journals/index.php/idr/index> , H index 15, Q2, SJR 0.813, <https://www.scopus.com/sourceid/19700194023>
 22. Tedjo Narko, Marlia Singgih Wibowo, **Sophi Damayanti**, Indra Wibowo: "Effect of Kombucha Culture on Caffeine and Chlorogenic Acid Content in Fermentation of robusta Green Coffee Beans (Coffea canephora L.)", Rasayan Journal Chemistry, Vol 13, No 2, April-Juni 2020, p1181-1186, ISSN: 0974-1496, Publisher: Rasayan Journal, <http://dx.doi.org/10.31788/RJC.2020.1325675>, <https://rasayanjournal.co.in/index.php>, H index 20, Q2, SJR 0.265, <https://www.scopus.com/sourceid/19400157518>
 23. Tedjo Narko, Marlia Singgih Wibowo, **Sophi Damayanti**, Indra Wibowo, Mochammad Arbi Hadiyat: "Optimization of Robusta Fermentation using Response Surface methodology", Coffee Science Vol.15, 2020, ISSN:18096875, Publisher: Editora UFLA, <http://www.coffeescience.ufla.br/index.php/Coffeescience/article/view/1671> , <http://www.coffeescience.ufla.br/index.php/Coffeescience>, H index 13, Q3, SJR 0.223, <https://www.scopus.com/sourceid/19600166402>
 24. Tedjo Narko, Marlia Singgih Wibowo, **Sophi Damayanti**, Indra Wibowo: "Acute Toxicity Test of Fermented Robusta Green Coffee Using Zebrafish Embryos (Donio rerio)", Pharmacognosy Journal Vol 12, Issue 3, May 2020, p485-492, ISSN:09753575, Publisher: Pharmacognosy Network Worldwide, <http://phcogj.com/article/1137> , <http://www.phcogj.com/> , H index 17, Q3, SJR 0.227, <https://www.scopus.com/sourceid/19700175096>

25. Dian Pitaloka, **Sophi Damayanti**, Anita Aluicia Artharini, Elin Yulinah Sukandar, Molecular docking, dynamics simulation, and scanning electron microscopy (SEM) Examination of Clinic, Indonesian Journal of Chemistry | vol: 19 | issue : 2 | 2019-01-01, <https://doi.org/10.22146/ijc.33731>. <https://jurnal.ugm.ac.id/ijc/> , H index 24, Q3, SJR 0.242, <https://www.scopus.com/sourceid/21100223536>
26. **Sophi Damayanti**, Tuan Norhafiza Binti Tuan Mat, Pimpichaya Tiyasuwan, Ondrej Bolcarovic, Wipawadee Yoo-in, Andhika B. Mahardhika, Supat Jiranusornkul, Development and Validation of Atomic Absorption Spectroscopic Method for Analysis of ZnO in Blemish Balm Cream, Chiang Mai Journal of Science, Chiang Mai Journal of Science Volume 45, Issue 1, January 2019, Pages 404-412
27. Atsarina Larasati Anindya, Risa Dwi Oktaviani, Benita Rachel Praevina, **Sophi Damayanti**, Neng Fisheri Kurniati, Catur Riani, Heni Rachmawati: "Xylan from Pineapple Stem Waste: a Potential Biopolymer for Colonic Targeting of Anti-inflammatory Agent Mesalamine", AAPS PharmSciTech, Vol.20, Issue 3, April 2019, article 112, ISSN: 15309932, Publisher: Springer International Publishing AG, <https://doi.org/10.1208/s12249-018-1205-y> ; <https://www.springer.com/journal/12249> ; H index 93, Q2, SJR 0,581, <https://www.scopus.com/sourceid/19374>
28. Dian Ayu Eka Pitaloka, **Sophi Damayanti**, Aluicia Anita Artarini, Elin Yulinah Sukandar: "Molecular Docking, Dynamics Simulation, and Scanning Electron Microscopy (SEM) Examination of Clinically Isolated Mycobacterium tuberculosis by Ursolic Acid: A Pentacyclic Triterpenes", Indonesian Journal of Chemistry Vol 19, No 2 (2019), p328-336, ISSN:14119420, Akreditasi No. 21/E/KPT/2018, 9 Juli 2018, Sinta 2, Publisher: Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Gadjah Mada, <https://doi.org/10.22146/ijc.33731> , <https://jurnal.ugm.ac.id/ijc/> , H index 24, Q3, SJR 0.242, <https://www.scopus.com/sourceid/21100223536>
29. Indra Wibowo, Kurnia Permadi, Rika Hartati, **Sophi Damayanti**: "Ethanol Extract of Pomegranate (*Punica granatum* L) peel: acute toxicity tests on zebrafish (*Dania rerio*) embryos and its toxicity prediction by in silico", Journal of Applied Pharmaceutical Science, Vol.8 No. 06, June 2018, pp082-086, ISSN: 2231-3354, Publisher: MediPoeia, https://www.japsonline.com/admin/php/uploads/2653_pdf.pdf , <https://www.japsonline.com/index.php> , H Index 33, Q2, SJR 0.224, <https://www.scopus.com/sourceid/21100236605>
30. Saeful Amin, **Sophi Damayanti**, Slamet Ibrahim: "Interaction binding study of dimethylamylamine with functional monomers to design a molecular imprinted polymer for doping analysis", Journal of Applied

- Pharmaceutical Science Vol: 8, Issue: 10, October, 2018, p025-031, ISSN:2231-3354, Publisher: MediPoeia,
https://www.japsonline.com/admin/php/uploads/2737_pdf.pdf,
<https://www.japsonline.com/index.php>, H index 33, Q2, SJR 0.224,
<https://www.scopus.com/sourceid/21100236605>
31. Amirah Adlia, Ilham Tomagola, **Sophi Damayanti**, Ardyanto Mulya, Heni Rachmawati: "Antifibrotic Activity and In Ovo Toxicity Study of Liver-Targeted Curcumin-Gold Nanoparticle", *Scientia Pharmaceutica* Vol 86, Issue 4 (December 2018), ISSN:22180532, Publisher: MDPI AG,
<https://doi.org/10.3390/scipharm86040041>,
<https://www.mdpi.com/journal/scipharm> , H index 37, Q2, SJR 0.306,
<https://www.scopus.com/sourceid/22212>
32. Saeful Amin, **Sophi Damayanti**, Slamet Ibrahim: "Synthesis and Characterization of Molecularly Imprinted Polymer with Dimethylamylamine as Template", *Asian Journal of Chemistry* Vol. 30, No.12 (2018), p2749-2753, ISSN:09707077, Publisher: Chemical Publishing Co.
<https://doi.org/10.14233/ajchem.2018.21588>,
<http://www.asianjournalofchemistry.co.in/Home.aspx> , H index 33, Q4, SJR 0.142, <https://www.scopus.com/sourceid/22703>
33. Wangsa Tetra Ismaya, Yunita, **Sophi Damayanti**, Caroline Wijaya, Raymond R. Tjandrawinata, Debbie Sofie Retnoningrum, Andheni Rachmawati: "In Silico Study to Develop a Lectin-Like Protein from Mushroom *Agaricus bisporus* for Pharmaceutical Application", *Scientia Pharmaceutica* Vol.84, Issue.1, 2016, p203-2017, ISSN:22180532, Publisher: MDPI AG,
<https://doi.org/10.3797/scipharm.ISP.2015.11>,
<https://www.mdpi.com/journal/scipharm>, H index 37, Q2, SJR 0.323,
<https://www.scopus.com/sourceid/22212>

XIII. HAKI

- Paten: Metode Sintesis Antibiotik Amoksisilin dari Asam 6-Amino Penisilat (6-APA) dan Garam Dane Tipe Garam Kalium Asam N-[2-Etoksikarbonil-1-Metilvinil]-A-Amino-(4-Hidroksifenil)-Asetat yang Diaktifkan dengan Etilkloroformat-2019-anggota
- **Hak Cipta:** Toksisitas In Vitro dan In Silico (EC00202119609)-Sophi Damayanti, Indra Winbowo, Neng Fisher.

XIV. CONFERENCES (Sejak 2016-LK)

1. Sophi Damayanti, Invited Speakers, The Role of Computational Chemistry in Developing of Molecular Imprinted Polymer for Separation Method 7th, 2023 ACS GII and ICCST 2023, Kuala Lumpur, Malaysia.
2. Untung Gunawan, Slamet Ibrahim, Atthar Luqman Ivansyah, Sophi Damayanti, In Silico Study of Molecularly Imprinted Polymer for Extraction of Voriconazole in Human Plasma, The 5th ISPST, The 3rd ISEJ & 13th Annual ISCC, October 18th-20th 2022, Bandung
3. Engrid Juni Astuti, Slamet Ibrahim, Muhammad Ali Zulfikar, Sophi Damayanti, In Silico Study of Molecularly Imprinted Polymer for Extraction Enoxaparin from Human Plasma, School of Pharmacy ITB 75th Anniversary International Seminar Green Pharmacy 2022, 11 – 12 Oktober 2022, Bandung
4. Hilda Aprilia Wisnuwardhani, Sophi Damayanti, Slamet Ibrahim, Computational design of *Molecularly Imprinted Polymer* for selective extraction of remdesivir from human plasma, 6th International Conference for Science and Technology (6th ICCST), October 29th – 31st 2021, Thailand
5. Anjar Hermadi Saputro, Aluicia Anita Artarini, Daryono Hadi Tjahjono, Aty Widyawaruyanti, Tutik Sri Wahyuni, Adita Ayu Permanasari, Sophi Damayanti, In Silico and In Vitro Studies of α -mangostin, Piperine, and Betasitosterol as Hepatitis C Antivirus (HCV), 6th International Conference for Science and Technology (6th ICCST), October 29th – 31st 2021, Thailand, Best Oral Presentation
6. Khonsa, Tasia Amelia, Dwi Larasati Setyaningrum, Anjar Hermadi Saputro, Sophi Damayanti, Pengembangan dan Validasi Metode Analisis Penetapan Kadar β -Sitosterol Pada Suplemen Menggunakan Kromatografi Cair Kinerja Tinggi (KCKT), Rakernas dan PIT IAI Virtual 2021, 26-28 Agustus 2021, Poster Terbaik III
7. Sophi Damayanti, Bhekti Pratiwi, Muhammad Azhari, Sry Indah Insani, Iwa Kartiwa and Titi Sudiati, Knowledge Level Study on Self Medication and Safety Nutrition in Residents of Tourism Area Pangandaran West Java Indonesia, FIP Regional Conference SEAR Asian Pacific Region PIT IAI, 1 - 3 April 2020, Bali.
8. Sophi Damayanti, Mia Savira, Benny Permana, Development Of Simultaneous Analysis Method For Determining Level Of Losartan Potassium And Hydroclorotiazid In Tablets Using High Performance

Liquid Chromatography, 3rd Asia Pharm, Shah Alam Malaysia, 27-30 August 2019

9. Tursino, Elin Julianti, Sophi Damayanti, Tutus Gusdinar, C-Fikosianin dari *Spirulina platensis* sebagai Kandidat Substrat untuk Pengujian Aktivitas Enzim Protease: Studi Pendahuluan, 13-15 Maret 2019, Best Poster
10. Sophi Damayanti, Kurnia Permadi, Neng Fisheri, Rika Hartati, Indra Wibowo, Interactional study of compounds in pomegranate (*Punica granatum*) peel as antituberculosis agent with MTB enzyme, 2nd Bandung ICMC, 5-6 Oktober 2017, 1st Best Poster
11. Widya Dwi Aryati, Benny Permana, Sophi Damayanti, In Silico Prediction of Mutagenicity and Carcinogenicity of Colorants Used in Pharmaceutical Preparation, 2nd Bandung ICMC, 5-6 Oktober 2017
12. Purnawan Pontana, Benny Permana, Sophi Damayanti, In silico: toxicity prediction of preservatives using software admet predictor, qsar toolbox, toxtree and toxicity estimation software tool (test), 2nd Bandung ICMC, 5-6 Oktober 2017
13. Tedjo Narko, Sophi Damayanti, Indra Wibowo, Marlia Singgih Wibowo, Effect of kombucha culture on caffeine and chlorogenic acid content in fermentation of robusta green coffee beans (*Coffea canephora* L.), 2nd Bandung ICMC, 5-6 Oktober 2017
14. Sophi Damayanti, Anindita Trikusuma, Rika Hartati, Indra Wibowo, 11th AFMC International Medicinal Chemistry Symposium (AIMECS 2017), *Eleutherine Palmifolia*: Antimicrobial, toxicity to zebrafish and toxicity prediction, 23 – 26 Juli 2017, Melbourne, Australia
15. Indra Wibowo, Mira Mutiyani, Sophi Damayanti, Utami, Identification of nutritional constituent and phytochemical profiles of red and black rice from East Java, Indonesia, 6th ICAEBS, Malaysia, 21-22 Desember 2016
16. Irka Wijaya, Lia Amalia, Sophi Damayanti, “Survey of cosmetics safety knowledge level and qualitative analysis of hydroquinone and mercury in selected samples”, International Seminar on Pharmacology and Clinical Pharmacy (ISPCP), 1-2 September 2016, Bandung, Indonesia
17. Yanuari Tri Tyasti, Zulfan Zazuli, Cindra Tri Yuniar, Sophi Damayanti, Lia Amalia, “Knowledge of Medicine Management in A Densely Populated Subdistrict in Bandung”, International Seminar on Pharmacology and Clinical Pharmacy (ISPCP), 1-2 September 2016, Bandung, Indonesia
18. Sophi Damayanti, Indah Mutmainah, Tutus Gusdinar, “Health Profiles of Footwear Workers by Analyzing Hematologic Profile, Value of Aspartate

Transaminase (AST) And Alanine Transaminase (ALT), And Lifestyle Profiles”, Asian Conference on Clinical Pharmacy, July 14th-17th, 2016, Seoul, Korea

XV. BUKU ILMIAH

1. 2023: 93nggam Asa Dalam Karsa Dan Karya, Kolaborasi Dosen Itb Alumni Itb Angkatan 93, Itb Press Publisher
2. 2021: Ayu Purwarianti, Bambang Riyanto, Dessi Puji Lestari, Intan Muchtadi-Alamsyah, Nugraha Priya Utama, Ridwan Sutriadi, Sapto Wahyu Indratno, Sophi Damayanti, Artificial Intelligence di Masa Pandemi, ITB Press Publisher
3. 2020: Indra Wibowo, Neng Fisheri Kurniati, Sophi Damayanti, Toksisitas In Vivo dan In Silico: Prinsip dan Aplikasi, ITB Press Publisher
4. 2019: Sophi Damayanti, Yangie Dwi Marga Pinanga, Muhamad Azhari, Bhakti Pratiwi, Qouniitah Fadhilah, Benny Permana, Tursino, Kader Kesehatan Sebagai Mitra Apoteker, ITB Press Publisher



XVI. BUKU FIKSI

(Nama Pena: Ophi Nurwicaksono)

1. 2022: Patois: Kumpulan Puisi, E-Book
2. 2020: Cerita Saat Jeda (Compilation Stories During Break Of Pandemic), 27 Writers, ITB Press Publisher

3. 2019: I Love You Anyway, Phoenix Publisher
4. 2018: Pancarona Cinta, Phoenix Publisher

XVII. PENGHARGAAN

1. Best Oral Presenter-International Conference of Drug Development and Discovery, Penang-Malaysia, 2024
2. Satya Karya Lencana Satya 10 tahun Presiden Republik Indonesia, 2023
3. Penghargaan Rektor ITB untuk Dosen Bidang Pengajaran-Dies Natalis ITB, 2016
4. Poster bersama Mahasiswa: 1st Best Poster, ICPRP, UII Yogyakarta, 2022, 3rd Best Poster, PIT IAI, 2021, 1st Best Poster, 2nd Bandung ICMC, 2015, 1st Best Poster, ISPST, 2014, 3rd Best Poster, ICCST, 2014, 1st Best Poster, PIT IAI, Padang, 2013

ITB PRESS

📍 Gedung STP ITB, Lantai 1,
Jl. Ganesa No. 15F Bandung 40132
☎ +62 22 20469057
🌐 www.itbpress.id
✉ office@itbpress.id
👤 Anggota Ikapi No. 043/JBA/92
📄 APPTI No. 005.062.1.10.2018

**Forum Guru Besar
Institut Teknologi Bandung**

Jalan Dipati Ukur No. 4, Bandung 40132
E-mail: sekretariat-fgb@itb.ac.id
Telp. (022) 2512532

🌐 fgb.itb.ac.id | [f FgbItb](https://www.facebook.com/FgbItb) | [t FGB_ITB](https://twitter.com/FGB_ITB)
📸 [@fgbitb_1920](https://www.instagram.com/fgbitb_1920) | [y Forum Guru Besar ITB](https://www.youtube.com/ForumGuruBesarITB)

ISBN 978-623-297-593-4

