

# PEMBENTUKAN DAN KARAKTERISASI KOMPLEKS INKLUSI KAFEIN DENGAN GARAM AMONIUM $\beta$ -SIKLODEKSTRIN KLORIDA

Oleh

Rossi Valentino Setyawan, NIM 2113081014

Jurusan Kimia

## ABSTRAK

Kafein (CAF) merupakan senyawa alkaloid dari golongan purin yang dikenal luas karena aktivitas farmakologisnya, seperti meningkatkan kewaspadaan, memperbaiki suasana hati, dan berperan sebagai antioksidan. Namun, kelarutan CAF yang rendah dalam air sebesar 26 mg/mL menjadi kendala dalam optimalisasi bioavailabilitasnya. Penelitian ini bertujuan untuk meningkatkan kelarutan dan kestabilan CAF melalui pembentukan kompleks inklusi dengan  $\beta$ -siklodekstrin ( $\beta$ -CD) serta turunannya yang dimodifikasi menjadi garam amonium, yaitu  $\beta$ -CD-NH<sub>3</sub>Cl dan  $\beta$ -CD-NH<sub>2</sub>PrCl. Kompleks inklusi dibentuk menggunakan metode *co-precipitation* dengan rasio molar 1:1,1 mmol antara  $\beta$ -CD atau turunannya sebagai *host* dan CAF sebagai *guest molecule*. Kompleks inklusi CAF/ $\beta$ -CD, CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>3</sub>Cl, dan CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>2</sub>PrCl yang terbentuk dikarakterisasi dengan instrumen UV-Vis untuk penentuan konstanta asosiasi ( $K_a$ ), serta FTIR, dan X-RD untuk mengidentifikasi interaksi dan struktur kristal. Hasil penelitian menunjukkan bahwa kompleks inklusi berhasil terbentuk dengan peningkatan signifikan pada kelarutan dan nilai  $K_a$ . Kompleks inklusi CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>2</sub>PrCl memiliki kelarutan tertinggi sebesar 110,7-123,4 mg/mL dan  $K_a$  sebesar 274,18 M<sup>-1</sup>, diikuti oleh CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>3</sub>Cl (32,7-47,6 mg/mL; 102,1 M<sup>-1</sup>) dan CAF/ $\beta$ -CD (23,3-42,6 mg/mL; 69,78 M<sup>-1</sup>). Analisis FTIR menunjukkan pergeseran pita serapan gugus -OH dan C=O, mengindikasikan interaksi molekuler. Analisis X-RD menunjukkan terjadinya perubahan pola difraksi, berupa pergeseran posisi puncak-puncak dan penurunan intensitasnya. Dapat disimpulkan bahwa modifikasi  $\beta$ -CD menjadi bentuk garam amonium meningkatkan kemampuan kompleksasi dan kelarutan CAF secara signifikan. Temuan ini dapat menjadi solusi inovatif dalam meningkatkan disolusi senyawa bioaktif hidrofobik dan berpotensi diterapkan dalam bidang farmasi serta teknologi formulasi obat.

Kata-kata kunci: Kafein, garam amonium  $\beta$ -CD, kompleks inklusi

# **FORMATION AND CHARACTERIZATION OF CAFFEINE INCLUSION COMPLEX WITH AMMONIUM $\beta$ -CYCLODEXTRIN CHLORIDE SALT**

**By**

**Rossi Valentino Setyawan, Student ID 2113081014**

**Department of Chemistry**

## **ABSTRACT**

Caffeine (CAF) is an alkaloid compound from the purine group, widely known for its pharmacological activities, such as enhancing alertness, improving mood, and acting as an antioxidant. However, its low solubility in water, at only 26 mg/mL, poses a challenge in optimizing its bioavailability. This study aims to improve the solubility and stability of CAF through the formation of inclusion complexes with  $\beta$ -cyclodextrin ( $\beta$ -CD) and its derivatives modified into ammonium salts, namely  $\beta$ -CD-NH<sub>3</sub>Cl and  $\beta$ -CD-NH<sub>2</sub>PrCl. The inclusion complexes were prepared using the co-precipitation method with a molar ratio of 1:1.1 mmol between  $\beta$ -CD or its derivatives as the host and CAF as the guest molecule. The resulting CAF/ $\beta$ -CD, CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>3</sub>Cl, and CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>2</sub>PrCl inclusion complexes were characterized using UV-Vis spectroscopy for the determination of association constants ( $K_a$ ), as well as FTIR and X-RD to identify molecular interactions and crystal structures. The results showed that the inclusion complexes were successfully formed, exhibiting a significant increase in solubility and  $K_a$  values. The CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>2</sub>PrCl complex showed the highest solubility of 110.7–123.4 mg/mL and a  $K_a$  of 274.18 M<sup>-1</sup>, followed by CAF/ $\beta$ -CD-NH<sub>3</sub>Cl (32.7–47.6 mg/mL; 102.1 M<sup>-1</sup>) and CAF/ $\beta$ -CD (23.3–42.6 mg/mL; 69.78 M<sup>-1</sup>). FTIR analysis revealed shifts in the absorption bands of –OH and C=O groups, indicating molecular interactions. X-RD analysis showed changes in the diffraction pattern, including shifts in peak positions and a decrease in peak intensities. It can be concluded that the modification of  $\beta$ -CD into ammonium salt forms significantly enhances the complexation ability and solubility of CAF. These findings offer an innovative solution for improving the dissolution of hydrophobic bioactive compounds and hold potential applications in the pharmaceutical field and drug formulation technology.

**Keywords:** caffeine, ammonium  $\beta$ -CD salt, inclusion complex