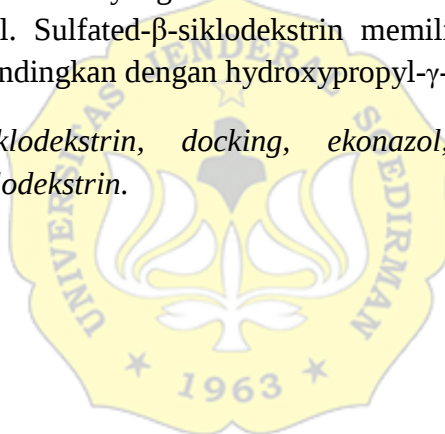


ABSTRAK

Ekonazol merupakan salah satu antijamur yang bersifat kiral. Pemisahan ekonazol telah banyak dilakukan dengan beberapa instrumen seperti Kromatografi Cair Kinerja Tinggi (KCKT) dengan menggunakan selektor kiral siklodekstrin. Pendekatan komputasi dengan metode *docking* umum dilakukan sebelum dilakukan metode pemisahan tersebut. Penelitian ini bertujuan untuk menunjukkan konformasi dari interaksi antara reseptor siklodekstrin dengan ligan ekonazol. Siklodekstrin yang digunakan meliputi S- β -CD dan HP- γ -CD. *Software AutoDock Vina* digunakan untuk mengetahui interaksi antara ekonazol dengan siklodekstrin. Tahap visualisasi interaksi ligan dengan reseptor dilakukan menggunakan *Software AutoDock Tools*. Proses analisis *docking* dilakukan dengan mengurutkan nilai energi ikatan yang diperoleh dan dihitung nilai RMSD-nya menggunakan *software PyMOL*. Berdasarkan penelitian, didapatkan R-ekonazol memiliki struktur yang lebih stabil karena nilai ΔG yang lebih besar daripada S-ekonazol. Sulfated- β -siklodekstrin memiliki aktivitas selektor kiral yang lebih baik dibandingkan dengan hydroxypropyl- γ -siklodekstrin.

Kata Kunci: siklodekstrin, *docking*, ekonazol, sulfated- β -siklodekstrin, hydroxypropyl- γ -siklodekstrin.



ABSTRACT

Econazole is a chiral antifungal. Econazole separation has been carried out with several instruments such as high performance liquid chromatography (HPLC) using a cyclodextrin selector. The computational approach with the docking method is generally carried out before the separation method is carried out. This study aimed to show the conformation of the interaction between the cyclodextrin receptor and the econazole ligand. Cyclodextrins which had been used were S- β -CD and HP- γ -CD. AutoDock Vina was used to determine the interaction between ekonazol and siklodekstrin. The visualization stage of the interaction of the ligand with the receptor was carried out using AutoDock Tools. The docking analysis process is carried out by sorting the bond energy values obtained and calculating the RMSD value using PyMOL software. Based on the research, it was found that R-econazole has a more stable structure due to its higher ΔG value than S-econazole. Sulfated- β -cyclodextrin has better chiral selector activity than hydroxypropyl- γ -cyclodextrin.

Keywords: siklodekstrin, docking, ekonazol, sulfated- β -siklodekstrin, hydroxypropyl- γ -siklodekstrin.

