

ABSTRAK

Tebukonazol merupakan golongan fungisida triazol yang bersifat kiral. Pendekatan komputasi dengan metode docking umum dilakukan sebelum metode pemisahan secara eksperimental. Metode docking molekul telah digunakan untuk memprediksi pemisahan enansiomer pada senyawa tebukonazol dengan menggunakan turunan siklodekstrin, seperti *sulfated*- β -siklodekstrin (S- β -CD), hidroksipropil- β -siklodekstrin (HP- β -CD) dan hidroksipropil- γ -siklodekstrin (HP- γ -CD) sebagai selektor kiral. Preparasi siklodekstrin menggunakan metode semi empiris PM3 dan preparasi tebukonazol menggunakan metode semi empiris AM1. Perhitungan titik tunggal menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada level B3LYP/6-311G (d,p) dilakukan untuk kompleks guna mendapatkan energi ikat yang lebih akurat. Nilai total energi pada perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) R-Tebukonazol/S- β -CD, S-Tebukonazol/S- β -CD, R-Tebukonazol/HP- β -CD, S-Tebukonazol/HP- β -CD, R-Tebukonazol/HP- γ -CD, S-Tebukonazol/HP- γ -CD, secara berturut turut yaitu -6253925,05; -6253931,14; -4362165,38; -4362165,82; -4866617,35; -4866620,99. S- β -CD sebagai selektor kiral dalam pemisahan senyawa kiral tebukonazol menghasilkan energi yang paling rendah dibandingkan dengan HP- β -CD dan HP- γ -CD. Berdasarkan penelitian, efektivitas penurunan turunan siklodeksrin sebagai selektor kiral secara berurutan adalah S- β -CD>HP- γ -CD>HP- β -CD.

Kata Kunci: *docking* molekul, siklodekstrin, tebukonazol

ABSTRACT

Tebuconazole is a chiral triazole fungicide. The computational approach with the common docking method is carried out before the experimental separation method. A Molecular docking method has been used to predict enantioseparation of tebuconazole using cyclodextrin derivatives such as sulfated- β -cyclodextrin (S- β -CD), hydroxypropyl- β -cyclodextrin (HP- β -CD), and hydroxypropyl- γ -cyclodextrin (HP- γ -CD). The preparation of cyclodextrin using the PM3 semi-empirical method and the preparation of tebuconazole using the AM1 semi-empirical method. A Density Functional Theory (DFT) single-point calculation at the level of B3LYP/6-311G (d,p) level was performed for the complex in order to obtain a more accurate binding energy. The value of total energy in Density Functional Theory (DFT) calculations R-Tebuconazole/S- β -CD, S-Tebuconazole/S- β -CD, R-Tebuconazole/HP- β -CD, S-Tebuconazole/HP- β -CD, R-Tebuconazole/HP- γ -CD, S-Tebuconazole/HP- γ -CD, respectively -6253925,05; -6253931.14; -4362165.38; -4362165.82; -4866617.35; -4866620.99. S- β -CD as a chiral selector in the separation of tebuconazole chiral compounds produced the lowest energy compared to HP- β -CD and HP- γ -CD. In addition, the effectiveness of using cyclodextrin derivatives as chiral selectors predicted enantioseparation of tebuconazole was S- β -CD>HP- γ -CD>HP- β -CD.

Keywords: *molecular docking, cyclodextrin, tebuconazole*

