

ABSTRAK

Prediksi pemisahan kiral R-/S-fenbukonazol terhadap turunan siklodekstrin, seperti S- β -CD, HP- β -CD, dan HP- γ -CD sebagai selektor kiral telah dilakukan dengan menggunakan pendekatan *docking* molekul. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui interaksi dan energi ikatan yang dihasilkan antara enansiomer fenbukonazol sebagai ligan dengan turunan siklodekstrin sebagai makromolekul menggunakan metode *docking* molekul. *Docking* molekul dilakukan dengan beberapa tahapan seperti optimasi struktur senyawa R-/S-fenbukonazol dan turunan siklodekstrin, *docking* antara konformasi teroptimasi senyawa R-/S-fenbukonazol dengan turunan siklodekstrin yang mengacu pada parameter energi ikatan dimana semakin rendah nilai energi ikatan maka ikatan yang terbentuk semakin kuat dan semakin stabil, serta perhitungan energi DFT kompleks inklusi. Diperoleh hasil *docking* molekul untuk S-fenbukonazol dengan S- β -CD menghasilkan energi ikat (ΔE) yang lebih rendah (-6,2 kkal/mol) dibanding R-fenbukonazol (-6,1 kkal/mol), untuk S-fenbukonazol dengan HP- β -CD menghasilkan energi ikat (ΔE) yang lebih rendah (-6,2 kkal/mol) dibanding R-fenbukonazol (-6,1 kkal/mol), dan untuk R-fenbukonazol dengan HP- γ -CD menghasilkan energi ikat (ΔE) yang lebih rendah (-5,0 kkal/mol) dibanding S-fenbukonazol (-4,8 kkal/mol). Hasil perhitungan energi DFT menunjukkan bahwa nilai total energi S- β -CD/R-fenbukonazol, S- β -CD/S-fenbukonazol, HP- β -CD/R-fenbukonazol, HP- β -CD/S-fenbukonazol, HP- γ -CD/R-fenbukonazol, dan HP- γ -CD/S-fenbukonazol berturut-turut sebesar -6310922,66; -6310920,78; -4419164,31; -4419176,36; -4923631,27; -4923633,47 kkal/mol. Berdasarkan nilai total energi tersebut, efektivitas penurunan turunan siklodekstrin sebagai selektor kiral secara berurutan yaitu S- β -CD>HP- γ -CD >HP- β -CD.

Kata kunci: *Docking* molekul, fenbukonazol, pemisahan kiral, siklodekstrin

ABSTRACT

Prediction of the chiral separation of R-/S-fenbuconazole against cyclodextrin derivatives, such as S- β -CD, HP- β -CD, and HP- γ -CD as chiral selectors has been carried out using a molecular docking approach. The aim of this study was to determine the interactions and bond energies produced between fenbuconazole enantiomers as ligands and cyclodextrin derivatives as macromolecules using the molecular docking method. Molecular docking is carried out in several stages such as optimization of the structure of the R-/S-fenbuconazole compound and cyclodextrin derivatives, docking between the optimized conformation of the R-/S-fenbuconazole compound and cyclodextrin derivatives which refers to the bond energy parameter where the lower the bond energy value, the bond formed getting stronger and more stable, as well as calculation of inclusion complex DFT energy. Molecular docking results for S-fenbuconazole with S- β -CD resulted in a lower binding energy (ΔE) (-6.2 kcal/mol) than R-fenbuconazole (-6.1 kcal/mol), for S-fenbuconazole with HP- β -CD produced a lower binding energy (ΔE) (-6.2 kcal/mol) than R-fenbuconazole (-6.1 kcal/mol), and for R-fenbuconazole with HP- γ -CD it produced lower binding energy (ΔE) (-5.0 kcal/mol) than S-fenbuconazole (-4.8 kcal/mol). The results of DFT energy calculations show that the total energy value of S- β -CD/R-fenbuconazole, S- β -CD/S-fenbuconazole, HP- β -CD/R-fenbuconazole, HP- β -CD/S-fenbuconazole, HP- γ -CD/R-fenbuconazole, and HP- γ -CD/S-fenbuconazole respectively -6310922.66, -6310920.78, -4419164.31, -4419176.36, -4923631.27, -4923633.47 kcal/mol. Based on the total energy value, the effectiveness of reducing cyclodextrin derivatives as chiral selectors sequentially is S- β -CD > HP- β -CD > HP- γ -CD.

Keywords: Chiral separation, cyclodextrin, fenbuconazole, molecular docking