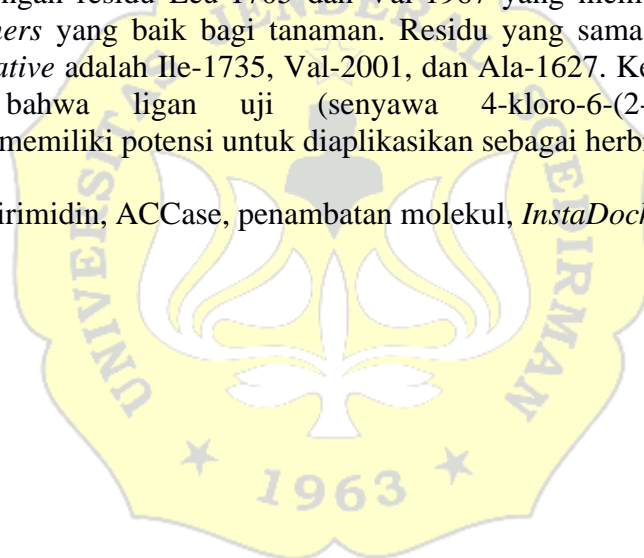


ABSTRAK

Pirimidin adalah senyawa aromatik yang turunannya memiliki aktivitas biologis sebagai pestisida, terutama pada herbisida. Enzim asetil-KoA karboksilase (ACCCase) dapat menjadi target herbisida karena terdapatnya proses biosintesis asam lemak. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui interaksi molekuler senyawa 4-kloro-6-(2-klorofenoksi)-2-fenilpirimidin sebagai herbisida terhadap ACCCase. Proses penambatan molekul dilakukan menggunakan *InstaDock* yang kemudian divisualisasikan hasilnya melalui *BIOVIA Discovery Studio 3.5 Visualizer*. Penelitian ini menggunakan *diclofop* sebagai ligan *native* dan senyawa 4-kloro-6-(2-klorofenoksi)-2-fenilpirimidin sebagai ligan uji. Hasil simulasi penambatan molekul menunjukkan nilai *binding free energy*, pKi, LE, dan *torsional energy* yang dimiliki ligan *native* berturut-turut, yaitu -9,4 kkal/mol; 6,89; 0,285 kkal/mol/non-H atom; dan 3,113 TEU. Sementara itu, nilai yang diperoleh pada ligan uji berturut-turut sebesar -7,3 kkal/mol; 6,09; 0,319 kkal/mol/non-H atom; dan 0,9339 TEU. Hasil visualisasi menunjukkan adanya interaksi molekuler dari ligan *native* dengan residu Leu-1705 dan Val-1967 yang memberikan aktivitas *herbicide safeners* yang baik bagi tanaman. Residu yang sama antara ligan uji dengan ligan *native* adalah Ile-1735, Val-2001, dan Ala-1627. Kesamaan tersebut menandakan bahwa ligan uji (senyawa 4-kloro-6-(2-klorofenoksi)-2-fenilpirimidin) memiliki potensi untuk diaplikasikan sebagai herbisida.

Kata kunci : pirimidin, ACCCase, penambatan molekul, *InstaDock*.



ABSTRACT

Pyrimidines are aromatic compounds which the derivatives have biological activity as pesticides, especially in herbicides. Acetyl-CoA carboxylase (ACCase) enzyme can be the target of herbicides due to the presence of fatty acid biosynthesis process. This study aims to discover the molecular interaction of 4-chloro-6-(2-chlorophenoxy)-2-phenylpyrimidine compounds as herbicides against ACCase. The molecular docking process was performed using InstaDock which then visualized the results through BIOVIA Discovery Studio 3.5 Visualizer. This study used diclofop as the native ligand and the 4-chloro-6-(2-chlorophenoxy)-2-phenylpyrimidine compound as the test ligand. The results of molecular docking simulation indicated the binding free energy, pKi, LE, and torsional energy values of the native ligand were -9.4 kcal/mol; 6.89; 0.285 kcal/mol/non-H atom; and 3.113 TEU, respectively. Meanwhile, the values obtained for the test ligand were -7.3 kcal/mol; 6.09; 0.319 kcal/mol/non-H atom; and 0.9339 TEU, respectively. The visualization results showed the molecular interaction of the native ligand with the residues Leu-1705 and Val-1967 which gives good herbicide safeners activity for plants. Similar residues between the test ligand and the native ligand were Ile-1735, Val-2001, and Ala-1627. These similarities indicate that the test ligand (4-chloro-6-(2-chlorophenoxy)-2-phenylpyrimidine compound) have the potential to be applied as a herbicide.

Keywords : pyrimidine, ACCase, molecular docking, InstaDock.

