

INTISARI

LISTYANI, T., 2019, ANALISIS DOCKING MOLEKULER SENYAWA DERIVAT *PHTHALIMIDE* SEBAGAI INHIBITOR NONNUKLEOSIDA HIV-1 REVERSE TRANSCRIPTASE BESERTA PREDIKSI PARAMETER ADME DAN TOKSISITAS, TESIS, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Senyawa derivat *phthalimide* dilaporkan sebagai kelas baru inhibitor nonnukleosida *reverse transcriptase*. Analisis *docking* molekuler senyawa derivat *phthalimide* terhadap enzim *reverse transcriptase* diperlukan untuk mengetahui afinitas dan pola interaksi antara senyawa di atas dengan enzim *reverse transcriptase*.

Senyawa derivat *phthalimide* dioptimasi geometri menggunakan perangkat lunak VegaZZ selanjutnya dilakukan dengan cara preparasi target, preparasi ligan, validasi metode *docking*, dan analisis *docking* menggunakan PyRx-Python 0.8 - AutoDock Vina sehingga didapatkan interaksi ligan dengan target, energi bebas pengikatan, ikatan hidrogen, dan pola interaksi

Pola interaksi dilihat dari tiga puluh tiga senyawa derivat *phthalimide* dengan enzim *reverse transcriptase* menunjukkan ikatan hidrogen dengan asam amino Lys101 dimana interaksi tersebut mirip dengan interaksi senyawa TIBO R 86183 yang merupakan ligan asli protein target.

Prediksi nilai ADME pada penelitian ini menggunakan program SwissADME yang dijalankan secara *online* di mana tiga puluh tiga senyawa derivat *phthalimide* memiliki berat molekul, nilai donor maupun akseptor ikatan hidrogen, dan nilai log P yang memenuhi kriteria dari Aturan *Lipinski*. Prediksi nilai toksisitas pada penelitian ini menggunakan metode *in silico* dengan program Toxtree v1.60 dan diketahui bahwa senyawa derivat *phthalimide* tidak bersifat karsinogenik dan mutagenik.

Kata kunci : inhibitor nonnukleosida *reverse transcriptase*, *phthalimide*, AutodockVina, SwissADME, Toxtree.

ABSTRACT

LISTYANI, T., 2018, MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF DERIVATE PHTHALIMIDE COMPOUNDS AS NON NUCLEOSIDE HIV-1 REVERSE TRANSCRIPTASE INHIBITORS AND PARAMETER PREDICTION OF ADME AND TOXICITY, THESIS, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA.

Phthalimide derivate compounds was reported as a new class of nonnucleoside reverse tranckriptase inhibitors. Docking molekuler analysis in phthalimide derivative compounds against reverse transcriptase enzym necessary to determine the affinity and interaction patterns between the above compounds with reverse transcriptase enzym.

Derived compounds phthalimide geometry optimized using VegaZZ software then performed by way of target preparation, ligand preparation, docking method validation, and analysis of docking using PyRx-Python0.8 - AutoDock vina so we get to the target ligand interactions, free energy bonding, hydrogen bonding, and interaction patterns.

Interaction pattern seen in thirty-three phthalimide derivatives with reverse transcriptase enzym showed hydrogen bonding with amino acids Lys101 where the interaction is similar to the interaction of TIBO R 86183 compounds which are the original ligands of the target protein.

The prediction of the ADME in this study using SwissADME which is run online where thirty-three phthalimide derivate compounds have molecular weight, hydrogen donor and acceptor bond, and log P that meet the criteria of Lipinski Rules. Prediction of toxicity in this study using in silico method with Toxtree v1.60 and it is known that phthalimide derivate compounds are not carcinogenic and mutagenic.

Keywords: nonnucleoside reverse transcriptase inhibitor, phthalimide, AutodockVina, SwissADME, Toxtree.