

# STUDI PENAMBATAN MOLEKUL DAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR AKTIVITAS (HKSA) TURUNAN EMODIN SEBAGAI INHIBITOR ALDOSA REDUCTASE (ALR2)

Shilvia Anggun Tiara Kaldella  
Program Studi Farmasi

## ABSTRAK

**Latar Belakang:** Neuropati diabetes adalah salah satu komplikasi dari diabetes melitus. Salah satu mekanisme terjadinya neuropati diabetes adalah melalui jalur poliol, dengan aldose reductase (ALR2) sebagai komponen utamanya. Untuk mencegah komplikasi neuropati diabetes, perlu dilakukan penghambatan terhadap ALR2. Turunan emodin diduga memiliki potensi sebagai agen penghambat ALR2. Oleh karena itu, dilakukan penelitian *in silico* untuk membuktikan bahwa turunan emodin dapat berfungsi sebagai agen penghambat ALR2 guna mencegah komplikasi neuropati diabetes.

**Tujuan:** Mengetahui potensi turunan emodin sebagai agen inhibitor terhadap ALR2.

**Metode:** Penelitian ini dilakukan dengan jenis penelitian eksperimental komputasi dengan 25 set senyawa turunan emodin substituen Ester, Karboksilat dan Proline pada posisi R1, R2, R7 dan R8, persamaan HKSA dan strategi pengembangan senyawa berdasarkan persamaan.

**Hasil :** Senyawa 18 merupakan senyawa turunan Emodin dengan potensi inhibitor ALR2 terbaik dengan skor docking -105. Pengembangan senyawa 27 merupakan optimasi senyawa 18 yang dikembangkan berdasarkan persamaan HKSA dengan nilai validasi persamaan  $R = 0.981$  ;  $s = 0.012$  ;  $F = 23.075$  ;  $p < 0.0001$  ;  $Q2 = 0.832$  ;  $SPress = 0.040$  ;  $SDEP = 0.018$ .

**Kata Kunci:** *Neuropati diabetic, Emodin, Penambatan molekul, HKSA*