

ABSTRAK

Reaksi glikasi adalah reaksi non-enzimatik antara protein/asam nukleat/lipid dengan gula pereduksi yang mana membentuk produk akhir yang dikenal dengan *advance glycation end products* (AGEs). Glukosa dan fruktosa dalam penelitian sebelumnya dilaporkan dapat bereaksi glikasi dengan *Human Serum Albumin* (HSA). Hasil penelitian *in vitro* sebelumnya telah membuktikan adanya interaksi yang menyebabkan cincin glukosa dan fruktosa terbuka saat berinteraksi dengan Lys-199 dan terbentuknya ikatan kovalen di Lys-195 dengan glukosa. Penelitian *in silico* sebelumnya melaporkan bahwa Lys-199 dan Lys-195 merupakan situs terjadinya interaksi paling kuat saat berinteraksi dengan glukosa linear. Penelitian ini masih bersifat umum sehingga tidak bisa menjelaskan interaksi yang terjadi di Lys-199 dan Lys-195 secara khusus. Tujuan penelitian ini adalah untuk memprediksi interaksi awal dalam reaksi glikasi dengan lebih akurat, berdasarkan parameter energi interaksi, spektrum UV, dan orbital molekul.

Penelitian ini menggunakan protein HSA dengan kode PDB 4IW2 sebagai reseptor. Struktur siklik dan linear pada glukosa dan fruktosa digunakan sebagai ligan. Penelitian ini dilakukan dengan metode *molecular docking* dengan tujuan mendapatkan posisi optimal dari interaksi reseptor dan ligan. Hasil yang didapat digunakan dalam perhitungan mekanika kuantum. Metode yang digunakan dari mekanika kuantum adalah *density functional theory* (DFT) dengan basis set B3LYP/6-31g(dp) dan *time dependent functional theory* (TDDFT). Perhitungan mekanika kuantum dilakukan dengan tujuan optimasi struktur molekul, mendapatkan orbital molekul dan spektra UV kompleks antara LK199C (Leu-Lys199-Cys) dan AK195Q (Ala-Lys195-Glu) dengan glukosa dan fruktosa.

Hasil penelitian ini adalah LK199C diprediksi memiliki potensi lebih besar untuk berinteraksi dengan glukosa siklik yang ditunjukkan dengan kompleks LK199C...Glukosa Siklik memiliki energi interaksi paling negatif yaitu -43,259 kJ/mol dan terbentuknya 2 ikatan hidrogen antara keduanya. AK195Q diprediksi memiliki potensi lebih besar untuk berinteraksi dengan glukosa linear yang ditunjukkan dengan kompleks AK195Q...Glukosa Linear memiliki energi interaksi paling negatif yaitu -44,283 kJ/mol dan juga terjadinya pergeseran spektra UV yang menggambarkan adanya perubahan konformasi pada reseptor dikarenakan interaksi reseptor dan ligan yang kuat.

Kata kunci: Reaksi glikasi, Protein HSA, Glukosa, Fruktosa, Mekanika Kuantum