

ABSTRAK

Hanif Putra Kusuma, 24020222130036. **Potensi Kompleks Astaxanthin-Cu²⁺ dan Astaxanthin-Zn²⁺ sebagai Kandidat Agen Multi-Target Sindrom Metabolik melalui Studi *In silico* dan Karakterisasinya menggunakan Spektrofotometri UV-Vis**, di bawah bimbingan Nurhayati dan Syahputra Wibowo.

Sindrom metabolik atau metabolic syndrome (MetS) merupakan kumpulan kondisi kesehatan yang mencakup hipertensi, obesitas sentral, resistensi insulin, dislipidemia, dan hiperurisemia merupakan ancaman kesehatan global yang memerlukan pendekatan terapi multi-target. Astaxanthin (Asx), pigmen karotenoid laut dengan aktivitas antioksidan tinggi, berpotensi sebagai agen terapeutik MetS. Pembentukan kompleks Asx dengan ion logam transisi tembaga (Cu²⁺) dan seng (Zn²⁺) secara teoritis meningkatkan stabilitas dan afinitas pengikatan, namun evaluasi komputasional komprehensif atas kompleks ini sebagai agen multi-target belum dilaporkan. Penelitian ini menggunakan pendekatan campuran: (1) spektrofotometri UV-Vis (190–690 nm) untuk mengonfirmasi pembentukan kompleks Asx–Cu²⁺ dan Asx–Zn²⁺; (2) simulasi penambatan molekuler (*molecular docking*) untuk mengevaluasi afinitas pengikatan terhadap 10 reseptor kunci MetS; dan (3) simulasi dinamika molekuler (MD) selama 10 ns pada suhu 300 K menggunakan CABS-flex 3.0 untuk menilai stabilitas kompleks ligan-reseptor. Hasil spektrofotometri mengkonfirmasi terbentuknya kompleks melalui pergeseran batokromik λ_{max} (kenaikan 1–2 nm), munculnya pita transfer muatan (*charge transfer band*) pada 263 nm (Asx-Cu) dan 256 nm (Asx-Zn), serta efek hipokromik. Simulasi *molecular docking* menunjukkan Asx murni dan kompleksnya memiliki nilai energi ikatan (ΔG) lebih negatif dibandingkan obat kontrol pada sebagian besar reseptor. Simulasi MD mengkonfirmasi stabilitas kompleks ligan-reseptor dengan nilai RMSD rata-rata keseluruhan 2,41–2,51 Å, profil RMSF yang meredam fluktuasi residu situs aktif, serta kekompakan geometri protein yang terjaga selama simulasi. Temuan ini mendukung potensi Astaxanthin dan kompleks bioinorganiknya sebagai kandidat agen multi-target MetS yang layak dikembangkan lebih lanjut secara *in vitro* dan *in vivo*.

Kata kunci: *Agen multi-target, astaxanthin (Asx), ion logam transisi, reseptor, sindrom metabolik (MetS)*