

ABSTRAK

Antioksidan adalah senyawa yang mampu melindungi sel-sel tubuh dari kerusakan akibat radikal bebas. Radikal bebas adalah molekul tidak stabil yang dapat merusak sel dan DNA, berkontribusi pada penuaan dan berbagai penyakit. Antioksidan bekerja dengan menetralkan radikal bebas, mencegahnya menyebabkan kerusakan lebih lanjut. Antioksidan dapat diproduksi dalam tubuh selama metabolismenya normal. Akan tetapi, ada beberapa antioksidan yang tidak dapat diproduksi sendiri oleh tubuh, seperti mikronutrien dan senyawa metabolik sekunder. Antioksidan tersebut dapat ditemukan pada bahan makanan, seperti rempah-rempah, buah-buahan, dan sayuran. Salah satunya adalah andaliman. Andaliman (*Zanthoxylum acanthopodium* DC.) memiliki potensi sebagai antioksidan karena mengandung berbagai senyawa bioaktif, terutama flavonoid, alkaloid, saponin, steroid, dan tanin. Fungsi andaliman sebagai antioksidan adalah menetralkan Radikal Bebas, terutama karena adanya senyawa flavonoid yang mampu mendonorkan elektron kepada radikal bebas, sehingga menstabilkannya dan mencegahnya merusak sel-sel sehat. Senyawa flavonoid yang terdapat dalam andaliman adalah molekul 2-metoksi-4-vinilfenol. Akan tetapi, keefektian antioksidan dalam andaliman bisa berkurang diakrenakan beberapa faktor seperti suhu, pH, maupun penyimpanan. Oleh karena itu dibutuhkan suatu sistem untuk menjaga agar senyawa antioksidan pada andaliman tidak rusak dan dapat sampai tepat pada sel tubuh, yaitu perlu dilakukannya metode enkapsulasi.

Pada penelitian ini, metode enkapsulasi 2-metoksi-4-vinilfenol dengan Kitosan dilakukan dengan kimia komputasi, melibatkan pemodelan *molecular docking* dan dinamika molekul. Pada *molecular docking* dilakukan penambatan molekul kitosan dengan 2-metoksi-4-vinilfenol yang telah diberikan variasi monomer yaitu 2,5,10 dan 15 untuk mengetahui energi ikat dan situs aktifnya dalam membentuk kompleks yang digunakan untuk mempelajari interaksi antar molekul dalam aplikasi enkapsulasi obat.

Hasil kompleks dengan variasi urutan ligan digunakan untuk mempelajari perubahan dinamika yang meliputi perubahan konformasi serta stabilitas kompleks yang terjadi menggunakan simulasi dinamika molekul dalam aplikasi mekanisme pelepasan obat. Dari hasil keseluruhan, diperoleh data bahwa kitosan 5...2M4VP paling stabil disbanding kompleks lainnya, dengan nilai energi interaksi yang paling rendah yaitu -4.260 kJ/mol dan nilai RMSD paling stabil di 35-50 ns yaitu 2.480 Å.