

INTISARI

Sintesis secara kimiawi seringkali menghasilkan limbah yang berbahaya bagi lingkungan. Oleh karena itu diperlukan adanya jalur sintesis alternatif yang lebih ramah lingkungan dan sesuai dengan prinsip *Green Chemistry*. Salah satu metode sintesis ramah lingkungan yang dapat dilakukan adalah dengan menggunakan enzim sebagai katalis. *Candida antarctica* Lipase B (CaLB) mampu digunakan sebagai katalis dalam reaksi pembentukan ester, amina, dan hidrolisis. CaLB bersifat regioselektif dan stereoselektif. Sifat regioselektif dan stereoselektif CaLB ditentukan oleh karakteristik situs aktif enzim tersebut. Substrat harus mampu menempati *binding site* enzim dengan baik untuk enzim dapat bekerja.

Dalam penelitian ini dilakukan kajian substrat alkil asetat serta substrat amina seperti apa yang kompatibel dengan CaLB dalam reaksi asetilasi amina. Penelitian ini dilakukan melalui *docking* menggunakan perangkat lunak MOE. Substrat alkil asetat yang digunakan adalah metil asetat, etil asetat, propil asetat, *i*-propil asetat, *n*-butil asetat, *i*-butil asetat, *s*-butil asetat, dan *t*-butil asetat. Sementara itu substrat amina yang digunakan adalah amina aromatik berupa anilin, *o*-aminofenol, *m*-aminofenol, dan *p*-aminofenol, serta amina alifatik berupa benzilamin, *p*-hidroksibenzilamina, *R*-4-(1-Aminoetil)fenol, dan *S*-4-(1-Aminoetil)fenol.

Substrat alkil asetat *n*-butil asetat dan *s*-butil asetat menghasilkan kompleks tetrahedral enzim-substrat dengan *score* terbaik. Sementara itu, *score docking* substrat amina alifatik terhadap CaLB terasetilasi nilainya lebih baik dibandingkan *score docking* substrat amina aromatik. Pada substrat amina kiral, substrat dengan bentuk *R* memiliki *pose* yang lebih baik dibandingkan bentuk *S*.

Kata kunci: *Molecular Docking*, Asetilasi, *Candida antarctica* Lipase B

ABSTRACT

Chemical synthesis usually produces wastes that are dangerous to the environment. An alternative synthesis pathway that is in accordance with Green Chemistry principles is needed to reduce dangerous wastes. One of the methods that can be used is synthesis using an enzyme as a catalyst. *Candida antarctica* Lipase B (CaLB) can catalyze hydrolysis reaction and also the formation of esters and amines. CaLB is a regioselective and stereoselective catalyst, this characteristic is determined by its active site's profile. To catalyze a reaction, the substrate must be able to bind to CaLB's binding site.

In this study, alkyl acetate substrates and amine substrates that are preferable to bind to CaLB's binding site were determined. This study was performed by docking using the software Molecular Operating Environment (MOE). Alkyl acetate substrates used were methyl acetate, ethyl acetate, *n*-propyl acetate, *i*-propyl acetate, *n*-butyl acetate, *s*-butyl acetate, *i*-butyl acetate, and *t*-butyl acetate. Amine substrates used were aromatic amines aniline, *o*-aminophenol, *m*-aminophenol, *p*-aminophenol, and aliphatic amines benzylamine, *p*-hydroxybenzylamine, *R*-4-(1-Aminoethyl)phenol, and *S*-4-(1-Aminoethyl)phenol.

Alkyl acetate substrates *n*-butyl acetate and *s*-butyl acetate produced tetrahedral substrate-enzym complex with the best score. Meanwhile, docking of aliphatic amine substrates towards acetylated CaLB produced better score than docking of aromatic amine substrates. Docking of chiral amine substrates indicated that *R* form is preferable than *S* form due to its pose against CaLB's binding pocket.

Keywords: Molecular Docking, Acetylation, *Candida antarctica* Lipase B