

ABSTRAK

Senyawa Etil Para Metoksisinamat (EPMS) yang diisolasi dari tanaman kencur dikenal memiliki berbagai aktivitas farmakologi yang baik bagi tubuh dibuktikan oleh berbagai penelitian. Namun pemanfaatan senyawa ini sebagai sediaan oral masih sedikit karena kelarutannya yang rendah dalam air. Sehingga dilakukan upaya peningkatan kelarutan EPMS dengan modifikasi bentuk menjadi multikomponen kristal. Pemilihan koformer sebagai pembentuk multikomponen diskriminasi melalui *molecular docking* menggunakan *software* AutodockTools-1.5.6. Dari enam koformer terpilih, hasil pertimbangan *energy binding*, ikatan hidrogen dan pKa, koformer asam suksinat, asam tartarat dan sakarin dilanjutkan untuk proses preparasi melalui *solvent evaporation* dengan perbandingan mol 1:1. Kemudian diuji kelarutannya lalu dikarakterisasi menggunakan FTIR, DSC dan mikroskop polarisasi untuk mengkonfirmasi pembentukan kristal. Berdasarkan teori ΔpK_a antara zat aktif dan koformer, interaksi EPMS-Asam suksinat dan EPMS-Asam tartarat membentuk kokristal sedangkan EPMS-Sakarin membentuk garam. Pembentukan kristal terbukti dengan adanya gugus fungsi bahan penyusun serta pembentukan ikatan hidrogen pada spektrum FTIR, penurunan titik leleh dan energi pada termogram DSC serta habit kristal baru yang ditunjukkan pada mikroskop polarisasi. Multikomponen kristal antara EPMS dan koformer mengalami peningkatan kelarutan dibandingkan EPMS murni dengan bentuk kokristal EPMS-Asam suksinat memberikan kelarutan paling baik.

Kata kunci: EPMS, Multikomponen kristal, Molecular docking, Koformer, pKa

ABSTRACT

Ethyl Para Methoxycinnamate (EPMS) compound isolated from kencur which is known to have various pharmacological activities that are good for the body has been proven by various studies. However, the use of this compound as an oral preparation is still low due to its low solubility in water. Therefore, efforts were made to increase the solubility of EPMS by modifying into multicomponent crystals. Selection of coformers as a component of multicomponent, screened through molecular docking using AutodockTools-1.5.6 software. Six selected coformers, the results of consideration of binding energy, hydrogen and pKa, coformers of succinic acid, tartaric acid and saccharin were continued for the preparation process through solvent evaporation with a mole ratio of 1:1. Then the solubility was tested and then characterized using FTIR, DSC and a polarizing microscope to confirm the crystal formation. Based on the pKa theory between the active substance and coformers, the interaction of EPMS-succinic acid and EPMS-tartaric acid forms cocrystals while EPMS-Saccharin forms salts. This is proven by the presence of functional groups of the constituent components and formation of hydrogen in the IR spectrum, the decrease in melting point and energy on the DSC thermogram and the new crystal habit shown on the polarization microscope. Multicomponent crystals between EPMS and coformers have higher solubility compared to pure EPMS with EPMS-succinic acid cocrystals providing the best solubility

Keywords: EPMS, Multicomponent crystal, Molecular docking, Coformer, pKa