

MOLECULAR DOCKING SENYAWA GOLONGAN FLAVONOL SEBAGAI ACE INHIBITOR

Raihan Tri Wahyudi
Program Studi Farmasi

ABSTRAK

Hipertensi merupakan penyakit yang banyak diderita oleh penduduk di Indonesia. Salah satu terapi untuk hipertensi adalah pemberian obat ACE inhibitor. Penggunaan obat dalam jangka waktu lama menaikkan resiko efek samping. Senyawa golongan flavonol memiliki khasiat untuk menurunkan hipertensi. Penelitian ini menggunakan metode *molecular docking* untuk memprediksi potensi senyawa-senyawa golongan flavonol lainnya sebagai ACE-Inhibitor. *Molecular docking* dilakukan menggunakan aplikasi PLANTS untuk memprediksi potensi senyawa *azaleatin*, *fisetin*, *galangin*, *kaempferol*, *myricetin*, dan kuersetin secara *in silico*. *Website ProTox-II* digunakan untuk memprediksi toksisitas senyawa *azaleatin*, *fisetin*, *galangin*, *kaempferol*, *myricetin*, dan kuersetin secara *in silico*. Hasil rata-rata skor *docking* terbaik yang diperoleh adalah $-109,55 \pm 0,2$ untuk Lisinopril sebagai ligan pembanding, $-68,77 \pm 0,3$ untuk kuersetin, $-67,57 \pm 1,11$ untuk *azaleatin*, $-76,04 \pm 0,01$ untuk *fisetin*, $-66,82 \pm 0,03$ untuk *galangin*, $-65,10 \pm 0,42$ untuk *kaempferol*, dan $-70,63 \pm 0,01$ untuk *myricetin*. Prediksi LD50 untuk mengetahui toksisitas senyawa flavonol adalah 5000 mg/kgBB untuk senyawa *azaleatin*; 3919 mg/kgBB untuk senyawa *galangin* dan *kaempferol*; 159 mg/kgBB untuk senyawa *fisetin*, *myricetin* dan kuersetin. Keenam senyawa flavonol memiliki potensi sebagai ACE inhibitor yang lebih rendah dibandingkan ligan pembanding lisinopril. Senyawa *fisetin*, *myricetin*, dan kuersetin bersifat toksik jika tertelan, sedangkan *azaleatin*, *galangin*, dan *kaempferol* dapat berakibat bahaya jika tertelan.

Kata Kunci: Flavonol, *molecular docking*, uji *in silico*, ACE inhibitor.

MOLECULAR DOCKING OF FLAVONOL COMPOUNDS AS ACE INHIBITOR

Raihan Tri Wahyudi
Pharmacy Program

ABSTRACT

Hypertension is a disease that affect many people in Indonesia. One of the treatment of hypertension is using ACE inhibitor medication. Flavonol compound has potency to lower hypertension. Long-term drug consumption increases risk of adverse effects. This study use molecular docking as a method to predict other flavonol compounds potency as ACE inhibitor. Molecular docking performed using PLANTS application to predict the potency of azaleatin, fisetin, galangin, kaempferol, myricetin and quercetin with in silico method. ProTox-II website used to predict toxicity of azaleatin, fisetin, galangin, kaempferol, myricetin and quercetin with in silico method. The average of best docking score are -109.55 ± 0.2 for lisinopril, -68.77 ± 0.3 for quercetin, -67.57 ± 1.11 for azaleatin, -76.04 ± 0.01 for fisetin, -66.82 ± 0.03 for galangin, -65.10 ± 0.42 for kaempferol, and -70.63 ± 0.01 for myricetin. Predicted LD50 to determine the toxicity of flavonol compounds are 5000 mg/kg for azaleatin; 3919 mg/kg for galangin and kaempferol; 159 mg/kg for fisetin, myricetin and quercetin. The six of tested flavonol compounds have lesser potential as ACE inhibitor compared to lisinopril. fisetin, myricetin, and quercetin are toxic if swallowed, while azaleatin, galangin, and kaempferol may be harmful if swallowed.

Keywords: Flavonol, molecular docking, in silico, ACE inhibitor.

LEMBAR PERSETUJUAN ABSTRAK

***MOLECULAR DOCKING* SENYAWA GOLONGAN
FLAVONOL SEBAGAI ACE INHIBITOR**

Disusun

Oleh:

RAIHAN TRI WAHYUDI

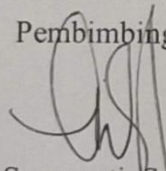
22010317130062

Telah disetujui

Semarang, 25 Januari 2024

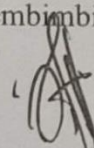
oleh:

Pembimbing 1



Indah Saraswati, S.Si., M.Sc.
NIP. 198409152010122007

Pembimbing 2



apt. Evieta Rohana, S.Farm., M.S.Farm.
NIP. H.7.198910112019112001