# *ABSTRACT*

***Docking Flavonoid Compounds in Banana Fronds (Musa sp.) as Anti-Inflammatories***

**Assyifa Hanum Salsabila, Aulia Rahman, Syaiful Prayogi**

**Email:** **assyifas63@gmail.com**

*Inflammation is one of the many diseases suffered by society and the antigen reaction from a disease can cause pain and inhibit activity. Therapy development needs to be carried out by exploring the potential of efficacious natural ingredients. Secondary metabolite compounds found in banana plant stems (Musa sp.) have anti-inflammatory activity by inhibiting the cyclooxygenase-2 (COX-2) enzyme. This research aims to determine the compounds from the midrib of banana plants (Musa sp.) which have anti-inflammatory activity through molecular docking and analyzing the anti-inflammatory activity of compounds from the midrib of banana plants (Musa sp.) on the 3LN1 enzyme. This research is an experimental qualitative study by identifying ligand-receptor complexes and the effects of combining ligands derived from plant compounds with receptors which are target proteins of inflammatory diseases using the molecular docking method. Molecular docking is carried out through several stages including compound structure modeling and optimization, 3LN1 protein preparation, docking validation, docking process, and interaction visualization. The results of the research show that the compounds from banana plant stems kaempferol-3-O-rutinoside and myricetin-3-O-rutinoside have the potential to be anti-inflammatory as indicated by MolDock Score respectively (-113.246), (-160.77) and various bonds in the form of hydrophobic and hydrogen.*

*Conclusion: A compound that has potential as a new anti-inflammatory drug candidate that inhibits the cyclooxygenase-2 (COX-2) enzyme is myricetin-3-O-rutinoside.*

*Key words: Banana (Musa sp.), Flavonoids, Inflammation, Midrib, Molecular Docking, Myricetin-3-O-rutinoside.*

# ABSTRAK

***Docking* Senyawa Flavonoid Pada Pelepah Pisang (*Musa* sp.) Sebagai Antiinflamasi**

**Assyifa Hanum Salsabila, Aulia Rahman, Syaiful Prayogi**

**Email:** **assyifas63@gmail.com**

Radang atau inflamasi merupakan salah satu dari sekian banyak penyakit yang diderita oleh masyarakat dan oleh reaksi antigen dari suatu penyakit yang dapat menimbulkan nyeri dan menghambat aktivitas. Pengembangan terapi perlu dilakukan dengan eksplorasi potensi bahan alam yang berkhasiat. Senyawa metabolit sekunder yang ada pada pelepah tanaman pisang (*Musa* sp.) memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi dengan menghambat enzim *siklooksigenase-*2 (COX-2). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa dari pelepah tanaman pisang (*Musa* sp.) yang memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi melalui *molecular docking* dan menganalisis bagaimana aktivitas antiinflamasi pada senyawa dari pelepah tanaman pisang (*Musa* sp.) terhadap enzim 3LN1. Penelitian ini merupakan penelitian kualitatif eksperimental dengan mengidentifikasi kompleks ligan-protein dan efek dari penyatuan ligan yang berasal dari senyawa tanaman dengan protein yang merupakan protein target dari penyakit inflamasi menggunakan metode *molecular docking*. *Molecular docking* dilakukan melalui beberapa tahap diantaranya pemodelan dan optimasi struktur senyawa, preparasi protein 3LN1, validasi *docking*, proses *docking*, dan visualisasi interaksi. Hasil penelitian menunjukan bahwa senyawa dari pelepah tanaman pisang kaempferol-3-*O*-rutinoside dan myricetin-3-*O*-rutinoside berpotensi sebagai antiinflamasi yang ditunjukan dengan *MolDock Score* berturut-turut (-113.246), (-160.77) dan berbagai ikatan berupa hidrofobik dan hidrogen.

Kesimpulan: senyawa yang berpotensi sebagai kandidat obat baru antiinflamasi yang menghambat enzim *sikloolsigenase-2* (COX-2) adalah myricetin-3-*O*-rutinoside.

Kata kunci: Flavonoid, Inflamasi, *Molecular Docking*, Myricetin-3-*O*-rutinoside, Pelepah, Pisang (*Musa* sp.).