

ABSTRACT

IFANA NURUL AZIZAH. 2024. *SIMULASI MOLECULAR DOCKING KONSTITUEN ASAM LEMAK IKAN BANDENG (Chanos chanos F.) TERHADAP RESEPTOR CYP7A1 SEBAGAI ANTIHIPERKOLESTEROLEMIA.* SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Pudjono dan Syaiful Prayogi

High cholesterol is a major risk factor for heart disease and stroke with an estimated 2.6 million deaths worldwide. Long-term use of statin drugs can cause serious side effects, so it is necessary to develop therapies that have specific targets and are highly selective against hypercholesterolemia by exploring the potential of natural nutrients. The compound constituent of fish fatty acids (Chanos chanos F.) has antihypercholesterolemia activity by increasing the activity of the enzyme CYP7A1. The study aims to identify the constituent fatty acid of fish chanos (Chaanos F.) which has activity as antihypercholesterolemia and analyze the antihyperscholesterolemic activity of these compounds against the enzyme CYP7A1 through molecular docking. The study is an exploratory qualitative study by identifying the ligand-receptor complex and effects of ligand association derived from animal compounds with receptors that are target proteins of hypercholesterolemia using molecular docking method in silico. Molecular docking is carried out through several stages, including compound modelling and optimization, enzyme preparation, docking validation, docking process, visualization and ADME prediction. The results show that docosahexaenoic and eicosapentaenoic acid compounds have binding energies of -113,929 kcal/mol and -108,151 kkal/mol respectively which have the potential as antihypercholesterolemic against the CYP7A1 receptor compared to the reference compound (atorvastatin) and form a variety of bonds such as hydrogen and hydrophobic bonds. ADME predictions indicate that there are three compounds that meet the Lipinski Rule of Five, docosaheksaenoic acids, eicosapentaenoic acid, and arachidonic acid.

Keywords: Hypercholesterolemia, fish fatty acids, molecular docking, ADME.

ABSTRAK

IFANA NURUL AZIZAH. 2024. *SIMULASI MOLECULAR DOCKING KONSTITUEN ASAM LEMAK IKAN BANDENG (*Chanos chanos* F.) TERHADAP RESEPTOR CYP7A1 SEBAGAI ANTIHIPERKOLESTEROLEMIA*. SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Pudjono dan Syaiful Prayogi

Kolesterol tinggi menjadi faktor risiko utama penyakit jantung dan stroke dengan perkiraan 2,6 juta kematian di seluruh dunia. Penggunaan obat golongan statin dalam jangka panjang dapat menyebabkan efek samping serius, sehingga diperlukan pengembangan terapi yang memiliki target spesifik dan tinggi selektifitasnya terhadap hiperkolesterolemia dengan mengeksplorasi potensi bahan alami yang berkhasiat. Senyawa konstituen asam lemak ikan bandeng (*Chanos chanos* F.) memiliki aktivitas sebagai antihiperkolesterolemia dengan meningkatkan aktivitas enzim CYP7A1. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui konstituen asam lemak ikan bandeng (*Chanos chanos* F.) yang memiliki aktivitas sebagai antihiperkolesterolemia dan menganalisis aktivitas antihiperkolesterolemia pada senyawa tersebut terhadap enzim CYP7A1 melalui *molecular docking*. Penelitian ini merupakan penelitian kualitatif eksploratif dengan mengidentifikasi kompleks ligan-reseptor dan efek dari penyatuan ligan yang berasal dari senyawa hewan dengan reseptor yang merupakan protein target dari penyakit hiperkolesterolemia menggunakan metode *molecular docking* secara *in silico*. *Molecular docking* dilakukan melalui beberapa tahapan, antara lain pemodelan dan optimasi senyawa, preparasi enzim, validasi *docking*, proses *docking*, visualisasi dan prediksi ADME. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa asam *docosahexaenoic* dan asam *eicosapentaenoic* memiliki energi ikatan masing-masing sebesar -113,929 kkal/mol dan -108,151 kkal/mol yang berpotensi sebagai antihiperkolesterolemia terhadap reseptor CYP7A1 dibandingkan dengan senyawa pembanding (atorvastatin) dan membentuk berbagai ikatan seperti ikatan hidrogen dan hidrofobik. Hasil prediksi ADME menunjukkan bahwa terdapat tiga senyawa yang memenuhi aturan *Lipinski Rule Of Five*, yaitu asam *docosahexaenoic*, asam *eicosapentaenoic*, dan asam arakidonat.

Kata kunci : Hiperkolesterolemia, asam lemak ikan bandeng, *molecular docking*, ADME.