

ABSTRACT

M.FARDAN RIZQULOH. 2024. *DOCKING MOLECULAR SENYAWA FLAVONOID DAUN SEMBUNG (Blumea balsamifera (L.)) TERHADAP ENZIM SIKLOOKSIGENASE-2 (COX-2) SEBAGAI ANTIINFLAMASI GOUT ARTHRITIS.* SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Ubun Fadli Serahli, Syaiful Prayogi

Gout Arthritis is one type of arthritis disease that has a high incidence rate seen from the diagnosis data of health workers. The use of non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) in the long term can cause adverse side effects, it is necessary to develop therapies that have specific targets and are safe against anti-inflammatory gout arthritis by utilizing natural materials. Flavonoid compounds in sembung leaves (Blumea balsamifera (L.)) are able to inhibit the COX-2 enzyme so that it has activity as an anti-inflammatory gout arthritis. This study aims to determine flavonoid compounds as anti-inflammatory gout arthritis and analyze the anti-inflammatory activity of gout arthritis from sembung leaves (Blumea balsamifera (L.)) through molecular docking. This research is an explorative qualitative research by identifying the complexation and effects of combining ligands derived from natural material compounds with target proteins from gouty arthritis using molecular docking method in silico. There are several stages in molecular docking including compound modeling and optimization, enzyme preparation, docking validation, docking process, visualization and ADMET prediction. The results showed that quercetin and tamarixetin compounds have a bond energy of -83.385 kcal/mol and -81.919 kcal/mol, respectively, which have potential as anti-inflammatory gout arthritis compared to the comparison compounds (ibuprofen and rofecoxib) and various bonds formed in the form of hydrogen and hydrophobic bonds. COX-2 enzyme is more selective than COX-1 enzyme. ADMET prediction results showed that there were 3 compounds that included the Lipinski rule of five including: quercetin, tamarixetin and rhamnetin.

Keywords: Sembung leaf, flavonoids, COX-2, gout arthritis, molecular docking, ADMET.

ABSTRAK

M.FARDAN RIZQULOH. 2024. *DOCKING MOLECULAR* SENYAWA FLAVONOID DAUN SEMBUNG (*Blumea balsamifera* (L.)) TERHADAP ENZIM SIKLOOKSIGENASE-2 (COX-2) SEBAGAI ANTIINFLAMASI *GOUT ARTHRITIS*. SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Ubun Fadli Serahli, Syaiful Prayogi

Gout Arthritis merupakan salah satu jenis penyakit arthritis yang memiliki angka kejadian yang cukup tinggi terlihat dari data diagnosis tenaga kesehatan. Penggunaan obat-obatan antiinflamasi non steroidal (AINS) dalam jangka waktu yang panjang dapat menyebabkan efek samping yang merugikan, perlu dilakukan pengembangan terapi yang memiliki target spesifik dan aman terhadap antiinflamasi *gout arthritis* dengan memanfaatkan bahan alam. Senyawa flavonoid pada daun sembung (*Blumea balsamifera* (L.)) mampu menghambat enzim COX-2 sehingga memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi *gout arthritis*. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa flavonoid sebagai antiinflamasi *gout arthritis* dan menganalisis aktivitas antiinflamasi *gout arthritis* dari daun sembung (*Blumea balsamifera* (L.)) melalui *molecular docking*. Penelitian ini merupakan penelitian kualitatif eksploratif dengan mengidentifikasi kompleksasi dan efek dari penggabungan ligan yang berasal dari senyawa bahan alam dengan protein target dari penyakit *gout arthritis* menggunakan metode *molecular docking* secara *in silico*. Ada beberapa tahap dalam *molecular docking* diantaranya pemodelan dan optimasi senyawa, preparasi enzim, validasi *docking*, proses *docking*, visualisasi dan prediksi ADMET. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa quercetin dan tamarixetin memiliki energi ikatan berturut-turut sebesar -83,385 kkal/mol dan -81,919 kkal/mol yang berpotensi sebagai antiinflamasi *gout arthritis* dibandingkan dengan senyawa pembanding (ibuprofen dan rofecoxib) dan berbagai ikatan yang terbentuk berupa ikatan hidrogen dan hidrofobik. Enzim COX-2 lebih selektif dibandingkan enzim COX-1. Hasil prediksi ADMET menunjukkan bahwa terdapat 3 senyawa yang termasuk aturan *lipinski rule of five* diantaranya: quercetin, tamarixetin dan rhamnetin.

Kata kunci : Daun sembung, flavonoid, COX-2, *gout arthritis*, *molecular docking*, ADMET.