

ABSTRAK

FIKRIYAH, R., 2020, ANALISIS DOCKING MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA LEMBAYUNG MALABAR (*Basella alba* L.) DAN BAYAM HIJAU (*Amaranthus viridis* L.) TERHADAP TARGET MOLEKULER TERAPI DISLIPIDEMIA, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Lembayung malabar (*Basella alba* L.) dan bayam hijau (*Amaranthus viridis* L.) dilaporkan memiliki aktivitas biologi sebagai terapi dislipidemia. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi sifat aktivitas dislipidemia dari kandungan kimia *Basella alba* dan *Amaranthus viridis* dan juga pola interaksi terhadap beberapa makromolekul target dislipidemia yaitu HMG-CoA reduktase (HMGCR), *Pancreatic lipase*, *Peroxisome Proliferator-Activated Receptor Alpha* (PPAR α), dan *Cholesteryl Ester Transfer Protein* (CETP) menggunakan *docking* molekuler.

Tahapan penelitian yang dilakukan adalah preparasi ligan uji dengan menggunakan MarvinSketch, VegaZZ dan AutodockTools 1.5.6. Validasi ligan dan protein target menggunakan Autodock 4, visualisasi hasil *docking* menggunakan PyMOL dan *Discovery Studio Visualizer*. Senyawa yang berhasil berikatan dengan protein target dilakukan uji profil farmakokinetik untuk menilai kualitas kandidat klinis sebagai obat baru, menggunakan ADMETLab.

Hasil kandungan kimia lembayung malabar yang memiliki afinitas terbaik pada protein target dislipidemia adalah senyawa *acacetin* dengan *binding affinity* pada HMGCR (-4,54 kkal/mol), *pancreatic lipase* (-7,10 kkal/mol), dan PPAR α (-6,13 kkal/mol), senyawa β sitosterol pada CETP (-10,36 kkal/mol). Kandungan kimia bayam hijau memiliki afinitas terbaik adalah senyawa rutin pada CETP (-6,54 kkal/mol), dan senyawa 9,12,15-octadecatrienoic acid pada PPAR α (-6,15 kkal/mol) dan *pancreatic lipase* (-5,26 kkal/mol). Prediksi ADME menunjukkan senyawa *acacetin* memiliki profil farmakokinetik yang paling baik.

Kata Kunci : *Docking* molekuler, ADMETLab, *Basella alba* , *Amaranthus viridis*, dislipidemia

ABSTRACT

FIKRIYAH, R., 2020, ANALYSIS DOCKING MOLECULAR CHEMICAL CONSTITUENTS LEMBAYUNG MALABAR (*Basella alba* L.) AND BAYAM HIJAU (*Amaranthus viridis* L.) AGAINST MOLECULAR TARGET DYSLIPIDEMIA THERAPY, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Basella alba and *Amaranthus viridis* are known to have a wide range of biological activity, one of them is dyslipidemia. This study aimed to study the molecular interaction of *Basella alba* and *Amaranthus viridis* phytochemical constituents to the various macromolecular targets of dyslipidemia agent HMG-CoA reductase (HMGCR), *Pancreatic lipase* (PL), *Peroxisome Proliferator-Activated Receptor Alpha* (PPAR α), dan *Cholesteryl Ester Transfer Protein* (CETP) used molecular docking.

The preparation of ligands was used MarvinSketch, VegaZZ, and AutodockTools 1.5.6. Validation of ligands and target proteins were used Autodock 4. Program PyMOL and Discovery Studio Visualizer were used to the visualizer molecular of ligand-macromolecule interactions. The compounds that successfully binding to the target protein were subjected to pharmacokinetic profile assay was assessed the quality of clinical candidate as new drug have been used ADMETLab.

The results from *Basella alba* compounds that have been the best binding affinity were *acacetin* for HMGCR (-4,54 kcal/mol), PL (-7,10 kcal/mol), and PPAR α (-6,13 kcal/mol). β sitosterol for CETP (-10,36 kcal/mol). *Amaranthus viridis* compounds that have been the best binding affinity were rutin for CETP (-6,54 kcal/mol), and 9,12,15-octadecatrienoic acid for PPAR α (-6.15 kcal/mol) and *pancreatic lipase* (-5,26 kcal/mol). ADME prediction indicated that *acacetin* has an excellent pharmacokinetic profile.

Key words: Docking molecular, ADMETLab, *Basella alba*, *Amaranthus viridis*, dyslipidemia.