

ABSTRAK

AGATHA RIA BUDIYANA, 2021, STUDI PENAMBATAN MOLEKULER DAN PREDIKSI PROFIL FARMAKOKINETIK KANDUNGAN KIMIA SELASIH (*Ocimum basilicum* L.) TERHADAP TARGET TERAPI TUBERKULOSIS, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Ismi Puspitasari, M.Farm.

Tuberkulosis merupakan penyakit menular yang disebabkan oleh *M. tuberculosis* bersifat tahan asam. Protein target terapi dari tuberkulosis berhasil diidentifikasi seperti P38 MAPK, ERK2, JNK, *Pantothenate Kinase* (PanK), dan Protein kinase G (PknG). Penggunaan herbal menjadi alternatif untuk pengobatan seperti kandungan senyawa dari selasih. Penelitian ini bertujuan mengetahui potensi senyawa selasih berikatan dengan protein target terapi dari tuberkulosis serta mengevaluasi parameter farmakokinetik senyawa terpilih.

Penelitian ini menggunakan metode penambatan molekuler dengan *software* Autodock 4 dengan ligan uji sebelas senyawa selasih (*Ocimum basilicum* L.). Hasil dipilih dengan mempertimbangkan *lowest binding energy* dan *num in clus*. Senyawa terpilih dilanjutkan dengan melihat interaksi ligan-protein menggunakan *Discovery Studio Visualizer* dan selanjutnya senyawa dilakukan prediksi farmakokinetik menggunakan ADMETLab.

Hasil dari proses penambatan molekul didapati enam senyawa dari selasih memiliki interaksi terbaik dengan protein terapi antituberkulosis yaitu senyawa *bacilicin*, *acetyl bacilicin*, *4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*, luteolin, orientin, dan asam rosmarinat. Hasil prediksi farmakokinetik dari senyawa terpilih mendapati hasil beragam namun senyawa terbaik adalah *bacilicin* dan *acetyl bacilicin*. Prediksi ini perlu diuji secara langsung untuk melihat potensi sesungguhnya.

Kata kunci : Tuberkulosis, selasih, *Ocimum basilicum*, penambatan molekuler

ABSTRACT

AGATHA RIA BUDIYANA, 2021, STUDY MOLECULAR DOCKING AND PREDICTION PHARMACOKINETIC PROFILE OF CHEMICAL CONSTITUENTS SELASIH (*Ocimum basilicum* L.) AGAINST TUBERCULOSIS THERAPY TARGETS, THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. and apt. Ismi Puspitasari, M.Farm.

Tuberculosis is an infectious disease caused by *M. tuberculosis* is acid resistant. Therapeutic target proteins from tuberculosis were identified as P38 MAPK, ERK2, JNK, *Pantothenate Kinase* (PanK), and Protein kinase G (PknG). The use of herbs is an alternative for treatment such as the compound content of basil. This study aims to determine the potential of basil compounds to bind to therapeutic target proteins of tuberculosis and to evaluate the pharmacokinetic parameters of selected compounds.

This study was used a molecular docking method with Autodock 4 software and eleven compounds of selasih (*Ocimum basilicum* L.) as test ligands. Results was selected taking into account the lowest binding energy and num in clus. The selected compounds was continued by observing the ligand-protein interaction using the Discovery Studio Visualizer and then the compound was carried out by pharmacokinetic predictions using ADMETLab.

The results of the molecular docking process found that six compounds from basil had the best interactions with antituberculosis therapeutic proteins, namely compounds *bacilicin*, *acetyl bacilicin*, *4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*, luteolin, orientin, and rosmarinic acid. The pharmacokinetic prediction results of the selected compounds found mixed results but the best compound chosen was *bacilicin* and *acetyl bacilicin*. This prediction needs to be tested directly to see its true potential.

Keywords : tuberculosis, selasih, *Ocimum basilicum*, molecular docking