

INTISARI

SOVIANA, F.F., 2021, STUDI BIOKEMOINFORMATIKA KANDUNGAN KIMIA DAUN INGGU (*Ruta angustifolia* L.) TERHADAP TARGET TERAPI HEPATITIS C, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Hepatitis merupakan suatu masalah kesehatan terbesar di dunia. Hepatitis C ialah penyakit peradangan hati disebabkan oleh virus hepatitis C (HCV). Beberapa penelitian telah membuktikan bahwa ekstrak daun inggu memiliki aktivitas antivirus terhadap HCV. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi target molekuler kandungan kimia daun inggu, memprediksi senyawa apa saja yang memiliki interaksi yang baik terhadap target molekuler antihepatitis C serta memprediksi parameter farmakokinetika kandungan kimia daun inggu.

Sebanyak enam senyawa aktif dari daun inggu diidentifikasi menggunakan *database Swiss target prediction* dan *SEA search* untuk memprediksi target molekuler yang sesuai dengan *pathway* hepatitis C spesies human. Selanjutnya makromolekul target dianalisis dengan metode penambatan molekuler menggunakan *AutoDock tools* kemudian melakukan tahapan prediksi farmakokinetika menggunakan *SwissADME* untuk menilai kualitas kandidat klinis potensial obat baru.

Hasil keseluruhan identifikasi menggunakan kedua *database* menghasilkan sembilan target molekuler dan tiga protein target dari HCV yang memiliki mekanisme kerja terhadap senyawa. Berdasarkan hasil penambatan molekuler diprediksi target molekuler potensial kandungan kimia daun inggu yakni EGFR, CDK4, CDK2, GSK3B, CASP3, NS3-4A dan NS5A dengan senyawa yang diprediksi berinteraksi terhadap target molekuler yakni senyawa chalepin, skopoletin, γ -fagarin, arborinin, kokusaginin dan *2-nonyl-4-hydroxyquinoline*. Pada prediksi ADME menunjukkan chalepin memiliki profil farmakokinetik terbaik yang memiliki kemampuan menembus sawar darah otak.

Kata kunci : antihepatitis C, *Ruta angustifolia* L, biokemoinformatika, *SwissADME*

ABSTRACT

SOVIANA, F.F., 2021, STUDY BIOCHEMOINFORMATICS OF THE CHEMICAL CONTENT OF INGGU LEAVES (*Ruta angustifolia* L.) AS THERAPY TARGETS OF HEPATITIS C, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Hepatitis is a major health problem in the world. Hepatitis C is an inflammation of the liver caused by the hepatitis C virus (HCV). Extract inggu leaves has been shown to be activity against HCV. The purpose of this research to predict the molecular target of the chemical content of inggu leaves, predict which compounds had good interaction with the molecular target of antihepatitis C and predict the pharmacokinetic parameters from the chemical content of inggu leaves.

Six active compounds from inggu leaves were identified using the *Swiss* target prediction database and SEA search to predict the molecular targets according to hepatitis C pathway of human species. Furthermore, target macromolecules were analyzed by molecular anchoring method using AutoDock tools and then performed pharmacokinetic prediction using *SwissADME* to assess the quality of potential clinical candidates for new drugs.

The overall results of the identification using the two databases resulted in nine molecular targets and three target proteins from HCV that have a mechanism of action against each compound. Based on the results of docking molecular, it is predicted that the potential molecular targets for the chemical content of inggu leaves are EGFR, CDK4, CDK2, GSK3B, CASP3, NS3-4A and NS5A with compounds predicted to interact with molecular targets namely chalepin, scopoletin, γ -fagarin, arborinin, kokusaginin and *2-nonyl-4-hydroxyquinoline*. ADME predictions indicate that chalepin has an excellent pharmacokinetic profile which has the ability to penetrate the blood brain barrier.

Keywords : antihepatitis C, *Ruta angustifolia* L, *biochemoinformatics*, *SwissADME*