

INTISARI

DYAH AYU MEILIANA DEWI GAYATRI, 2021, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER DAN PREDIKSI PROFIL FARMAKOKINETIK KANDUNGAN KIMIA BIJI PALA (*Myristica fragrans*) SEBAGAI KANDIDAT TERAPI ANXIETAS, PROPOSAL SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. Rina Herowati, M.Si., Apt dan Desi Purwaningsih, S.Pd., M.Si.,

Kecemasan merupakan keadaan emosional yang tidak menyenangkan disertai dengan rasa gelisah, ketidaknyamanan, dan kekhawatiran atau ketakutan akan ancaman masa depan yang pasti atau tidak pasti. Biji pala (*Myristica fragrans*) dinilai memiliki kemampuan sebagai calon tanaman obat anxietas. Saat ini masih belum banyak penelitian terkait kecemasan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui prediksi pola interaksi serta profil farmakokinetik dan toksisitas target anxietas pada senyawa-senyawa yang terdapat pada biji pala.

Penelitian ini menggunakan metode penambatan molekuler, biji pala sebagai senyawa uji dan GABA, MAO-B, mGluR1, dan NMDAR sebagai protein target anxietas. Penambatan molekuler menggunakan software PLANTS, YASARA, Marvin, Vega ZZ dan Biovia DS. Prediksi ADMET menggunakan webserver ADMETlab 2.0.

Hasil penelitian menunjukkan beberapa senyawa biji pala memiliki nilai afinitas yang baik, interaksi asam amino yang berperan, dan *binding pocket* yang mirip dengan ligan asli. Senyawa kimia *methyl eugenol*, *isoeugenol*, *licarin B*, safrole dan *elemicin* menunjukkan hasil yang baik terhadap protein target antianxietas. Prediksi profil farmakokinetik menunjukkan beberapa kandungan senyawa memiliki hasil ADMET yang baik. Senyawa safrole, *elemicin* dan *methyl eugenol* menunjukkan hasil yang baik, baik itu absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, serta memiliki toksisitas yang rendah sehingga senyawa safrole, *elemicin*, dan *methyl eugenol* diprediksi poten sebagai antiansietas.

Kata kunci : Anxietas, *Myristica fragrans*, penambatan molekuler, PLANTS, ADMETlab 2.0

ABSTRACT

DYAH AYU MEILIANA DEWI GAYATRI, 2021, ANALYSIS OF MOLECULAR DOCKING AND PREDICTION PHARMACOKINETIC PROFILE OF CHEMICAL CONTENT OF NUTMEG (*Myristica fragrans*) AS A CANDIDATE FOR ANXIETY THERAPY, PROPOSAL OF THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. Rina Herowati, M.Si., Apt and Desi Purwaningsih, S.Pd., M.Si.,

Anxiety is an unpleasant emotional state accompanied by discomfort, and worry or fear of a definite or uncertain future threat. Nutmeg (*Myristica fragrans*) is considered to have the ability as a candidate for the medicinal plant *anxietas*. There is currently not much research related to anxiety. Aim of this study to determine the prediction of interaction patterns as well as pharmacokinetic profiles and toxicity of *anxietas* targets in compounds that are imprinted on nutmeg seeds.

The study used molecular tethering methods, nutmeg as a test compound and GABA, MAO-B, mGluR1, and NMDAR as *anxietas* target proteins. Molecular tethering using PLANTS, YASARA, Marvin, Vega ZZ and Biovia DS software. ADMET prediction using ADMETlab 2.0 webserver.

The results showed some nutmeg compounds had good affinity values, instrumental amino acid interactions, and *binding pockets* similar to the original ligands. The chemical compounds methyl eugenol, isoeugenol, licarin B, safrole and elemicin showed good results against the target protein *antianxietas*. Predictions of pharmacokinetic profiles show some compound content has good ADMET results. Safrole, elemicin and methyl eugenol compounds show good results, be it absorbance, distribution, metabolism, excretion, and have low toxicity so that the compounds safrole, elemicin, and methyl eugenol are predicted to be potent as *antiansietas*.

Keywords : Anxiety, *Myristica fragrans*, molecular docking, PLANTS, ADMETlab