

INTISARI

SYAHRULFATH HIBATULLAH, 2021, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER TERHADAP PROTEIN TARGET ANTIDEPRESI DAN PREDIKSI PROFIL FARMAKOKINETIKA SENYAWA KANDUNGAN TANAMAN COKELAT (*Theobroma cacao*), 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.,

Depresi merupakan keadaan yang ditandai dengan timbulnya rasa gelisah, ketakutan akan sesuatu, kecemasan berlebih, berkurangnya mood dari seseorang. Tanaman coklat dinilai memiliki kemampuan sebagai calon tanaman obat antidepresi. Saat ini masih belum banyak penelitian terkait depresi terutama pada kandungan tanaman coklat, sehingga penambatan molekuler dirasa efektif untuk mengurangi waktu dan juga biaya dalam penelitian. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui prediksi pola interaksi serta profil farmakokinetik dan toksisitas target antidepresi pada senyawa-senyawa yang terdapat pada tanaman coklat.

Penelitian ini menggunakan metode penambatan molekuler, tanaman coklat (*Theobroma cacao*) sebagai senyawa uji dan mGluR1, NMDAR, MAO-A, GABA, dan AMPA sebagai protein target depresi. Penambatan molekuler menggunakan software PLANTS, YASARA, Marvin, Vega ZZ dan Biovia DS. Prediksi ADMET menggunakan *webserver* ADMETlab 2.0.

Hasil penelitian menunjukkan beberapa senyawa tanaman coklat memiliki afinitas, kesamaan asam amino, serta *binding pocket* yang baik terhadap protein target. Parameter penambatan molekuler menunjukkan senyawa asam kafeat, *catechin*, *epicatechin*, fenil alanine, kafein, neringenin dan triptamin menunjukkan hasil yang baik terhadap protein target antidepresi. Prediksi profil farmakokinetik menunjukkan beberapa kandungan memiliki hasil ADMET yang baik. Senyawa asam kafeat, fenil alanine, kafein dan triptamin menunjukkan hasil yang baik sehingga keempat senyawa diprediksi poten sebagai antidepresi.

Kata kunci : Depresi, tanaman coklat, *Theobroma cacao*, penambatan molekuler, PLANTS, ADMETlab 2.0

ABSTRACT

MOLECULAR DOCKING ANALYSIS ON ANTIDEPRESSION TARGET PROTEIN AND PREDICTION PHARMACOKINETIC PROFILE OF CACAO PLANT (*Theobroma cacao*) COMPOUNDS, 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.,

Depression is a condition characterized by the onset of anxiety, fear of something, excessive anxiety, reduced mood from a person. Cacao plants are considered to have the ability as candidates for antidepressant medicinal plants. Currently there is still not much research related to depression, especially in the cacao plant compounds, so molecular docking is considered effective to reduce time and also costs in research. Aim of this study is to determine the prediction of interaction patterns as well as the pharmacokinetic profile and toxicity of antidepressant targets in cacao plant compounds.

This study used the molecular docking method of cacao plants (*Theobroma cacao*) as test compound and mGluR1, NMDAR, MAO-A, GABA, and AMPA as protein targets for depression. Molecular docking uses PLANTS, YASARA, Marvin, Vega ZZ and Biovia DS software.

The results showed some cacao plant compounds had good affinity, amino acid similarities, and good pocket bindings to target proteins. Based on docking properties, caffeic acid, *catechin*, *epicatechin*, phenyl alanine, caffeine, neringenin and tryptamine showed good results to the receptor. Predictions of pharmacokinetic profiles show some contents have good ADMET results. The compounds kafeic acid, phenyl alanine, caffeine and triptamine showed good results both absorbance, distribution, metabolism, excretion, and have low toxicity so that the four compounds predicted potent as antidepressants.

Keywords : Depression, cacao plant, *Theobroma cacao*, molecular docking, PLANTS, ADMETlab 2.0