

ABSTRAK

YURDHA AURE PRATAMA 2024, PREDIKSI PROFIL FARMAKOKINETIK DAN TOKSISITAS TANAMAN JERUK PURUT (*citrus hystrix*) MENGGUNAKAN ADMETlab 3.0, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Nur Anggreini Dwi Sasangka, S.Farm., M.Sc.

Tanaman jeruk purut merupakan tanaman yang sering digunakan oleh masyarakat sebagai ramuan obat tradisional. Banyaknya perkembangan penggunaan obat tradisional di kalangan masyarakat mendorong penelitian terkait prediksi profil farmakokinetika dan toksisitas yang masih belum dilakukan..

Penelitian ini menggunakan webserver ADMETlab. Pengumpulan data senyawa menggunakan webserver KNApSAcK. Pengumpulan kode smile dilakukan dengan mengakses webserver PubChem. Seleksi kemiripan obat dilakukan pada webserver SwissADME . Pengumpulan data farmakokinetika ADME dan toksisitas menggunakan ADMETlab 3.0. Analisis dilakukan manual dengan membandingkan data yang diperoleh dengan keputusan empiris tiap parameter yang telah ada.

Hasil penelitian menunjukkan hanya 36% senyawa yang lolos pengujian druglikeness. Analisis ADME menunjukkan karakteristik berbeda berdasarkan golongan senyawa, hal ini dipengaruhi oleh sifat fisikokimia dan gugus fungsi spesifik dari kandungan senyawa golongan. Analisis toksisitas senyawa jeruk purut menunjukkan berpotensi toksik terutama karsinogenitasnya dan pada TOX21 *pathway* beberapa senyawa golongan terpenoid cenderung bersifat tidak aktif dibandingkan golongan senyawa lainnya. Prediksi kandidat obat terbaik yang memiliki profil farmakokinetika dan toksisitas adalah senyawa citronellyl formate.

Kata kunci : Jeruk purut, profil farmakokinetika, toksisitas, Admetlab 3.0.

ABSTRACT

YURDHA AURE PRATAMA 2024, PREDICTION OF PHARMACOKINETIC PROFILE AND TOXICITY OF PURPLE JERUK PLANT (*citrus hystrix*) USING ADMETlab 3.0, SKRIPSI, S1 PHARMACY STUDY PROGRAM, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. and apt. Nur Anggreini Dwi Sasangka, S.Farm., M.Sc.

Kaffir lime plant is a plant that is often used by the community as a traditional medicinal herb. The number of developments in the use of traditional medicine among the community encourages research related to the prediction of pharmacokinetic and toxicity profiles that have not yet been carried out.

This research uses ADMETlab webserver. Compound data collection using the KNApSAcK webserver. Smile code collection was done by accessing the PubChem webserver. Drug similarity selection was performed on the SwissADME webserver. ADME pharmacokinetics and toxicity data were collected using ADMETlab 3.0. The analysis was done manually by comparing the data obtained with the empirical decision for each parameter that already exists.

The results showed that only 36% of the compounds passed druglikeness testing. ADME analysis shows different characteristics based on the compound group, this is influenced by the physicochemical properties and specific functional groups of the compound group content. Toxicity analysis of kaffir lime compounds shows toxic potential, especially carcinogenicity and in the TOX21 pathway some terpenoid group compounds tend to be inactive compared to other compound groups. The best predicted drug candidate that has the best pharmacokinetics and toxicity profile is the compound citronellyl formate.

Keywords: Kaffir lime, pharmacokinetic profile, toxicity, Admetlab 3.0.