

INTISARI

SAPUTRI, F.D.V., 2020, ANALISIS DOCKING MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA KUNYIT (*Curcuma longa* L.) DAN BUNGA ROSELA (*Hibiscus sabdariffa* Linn.) TERHADAP PROTEIN TARGET ANTIATEROSKLEROSIS.

Aterosklerosis merupakan penyakit inflamasi kronik yang ditandai oleh terbentuknya plak dalam arteri besar. Penelitian sebelumnya melaporkan bahwa ekstrak kunyit (*Curcuma longa* L.) dan bunga rosela (*Hibiscus sabdariffa* Linn.) memiliki aktifitas sebagai antiinflamasi pada aterosklerosis namun kandungan senyawa potensial belum diketahui pasti. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa yang memiliki aktifitas terhadap protein target ERK1, ERK2, JNK1, JNK2, p38MAPK, dan NF- κ B sebagai antiinflamasi pada aterosklerosis.

Penelitian dilakukan secara *in silico* menggunakan metode *docking* molekuler. Tahapan penelitian yang dilakukan adalah preparasi ligan uji dengan menggunakan MarvinSketch dan VegaZZ, preparasi protein target dengan menggunakan AutodockTools 1.5.6, validasi ligan dan protein target menggunakan Autodock 4, serta visualisasi hasil *docking* menggunakan PyMOL dan *Discovery Studio Visualizer*.

Hasil *docking* dinilai dari energi ikatan yang terbentuk antara senyawa uji dengan protein dan interaksi yang sesuai dengan ligan asli. Semakin rendah nilai energi ikatan antara senyawa uji dengan protein target, maka kompleks yang terbentuk semakin stabil. Semakin sesuai interaksi senyawa uji dengan ligan asli maka semakin baik potensi senyawa tersebut. Hasil penelitian menunjukkan senyawa yang berpotensi menghambat aktivasi protein target yaitu *curcumin*, *calebin A*, *Bis-(4-hydroxycinnamoyl)methane*, *demethoxycurcumin* dari kunyit serta spinasterol dan ergosterol dari bunga rosela. Aktifitas dilihat melalui energi ikatan yang rendah (minus) dan pembentukan ikatan hidrogen pada interaksi senyawa terhadap protein target.

Kata kunci : aterosklerosis, kunyit, bunga rosela, *docking* molekuler

ABSTRACT

SAPUTRI, F.D.V., 2020, MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF TURMERIC CHEMICAL CONTENT (*Curcuma longa* L.) AND ROSELA FLOWERS (*Hibiscus sabdariffa* Linn.) AGAINST THE TARGET PROTEIN ANTIATHEROSCLEROSIS.

Atherosclerosis is a chronic inflammatory disease characterized by the formation of plaque in large arteries. Previous research has reported that turmeric extract (*Curcuma longa* L.) and rosela (*Hibiscus sabdariffa* Linn.) have antiinflammatory activity in atherosclerosis but the potential compound is not yet known. This research aims to find out which compounds have activity against target proteins ERK1, ERK2, JNK1, JNK2, p38MAPK, and NF- κ B as antiinflammatory in atherosclerosis.

The research was conducted in silico using molecular docking methods. The research phases are test ligand preparation using MarvinSketch and VegaZZ, target protein preparation using AutodockTools 1.5.6, ligand validation and target protein using Autodock 4, and visualization of docking results using PyMOL and Discovery Studio Visualizer.

Docking results are assessed from bonding energy formed between the test compound, protein and the interaction corresponding to the native ligand. The lower energy value of the bond between test compound and the target protein, more stable complex is formed. The more appropriate interaction of test compounds with native ligand then has potential to the target protein. The results showed compounds that could potentially inhibit activation of target proteins namely curcumin, calebin A, Bis-(4-hydroxycinnamoyl) methane, demethoxycurcumin from turmeric as well as spinasterol and ergosterol from rosela flowers. Activity is seen through low bond energy (minus) and the formation of hydrogen bonds in compound interactions against target proteins.

Keywords : atherosclerosis, turmeric, rosela, molecular docking