

ABSTRAK

ISNUR WAHYUNINGSIH, 2023, PREDIKSI SENYAWA BIOAKTIF KELOR (*Moringa oleifera*) SEBAGAI KANDIDAT TERAPI ARTRITIS REUMATOID DENGAN ANALISIS *DOCKING MOLEKULER*, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI. Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Dian Marlina, S.Farm., M.Sc., M.Si., Ph.D

Artritis reumatoid (AR) merupakan penyakit inflamasi autoimun yang menyerang jaringan persendian. Tanaman kelor memiliki kandungan senyawa flavonoid yang diprediksi memiliki khasiat antiinflamasi. Tujuan penelitian untuk mengetahui prediksi pola interaksi serta profil farmakokinetik dari senyawa-senyawa yang terkandung pada tanaman kelor.

Penelitian ini dilakukan menggunakan metode analisis docking molekuler dengan 20 kandungan senyawa kimia pada tanaman kelor dan makromolekul target artritis reumatoid (JAK3, TACE, dan mPGES1). Pengumpulan data senyawa tanaman dengan KNApSAcK. Identifikasi protein target menggunakan KEGG pathway, RCSB PDB, dan jurnal. Parameter dari analisis docking molekuler berupa pola interaksi, kesamaan asam amino, dan binding pocket. Parameter prediksi profil farmakokinetik berupa absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa dari tanaman kelor memiliki pola interaksi dan afinitas (≤ -70), kesamaan asam amino, serta binding pocket terhadap protein target AR. Senyawa niazinin, niazimicin A, niazimin A, niazicin A, niazicinin A, *ellagic acid*, niazidin, *epicatechin*, *myricetin*, apigenin, kaemferol, *quercetin*, *rhamnetin*, isorhamnetin, *caffeic acid*, *caffeoylquinic acid*, dan *moringyne* dari tanaman kelor memiliki asam amino Leu348 dan Gly249 terhadap protein TACE. Senyawa kimia niazimicin A, *epicatechin*, isorhamnetin, *caffeoylquinic acid*, dan *moringyne* dari tanaman kelor memiliki asam amino Glu903 dan Leu905 terhadap protein JAK3. Tidak ada satupun senyawa dari tanaman kelor yang memiliki pola interaksi yang baik terhadap protein mPGES1. Prediksi profil farmakokinetik pada penelitian ini diperoleh senyawa kimia *caffeic acid*, apigenin, *caffeoylquinic acid*, *niazinin*, dan niazimicin A dari tanaman kelor diprediksi memiliki profil farmakokinetik yang baik jika dilihat pada parameter fisikokimia, absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi dan semua senyawa tidak memiliki kemampuan untuk menembus sawar darah otak serta tidak memiliki aktivitas penghambatan terhadap enzim sitokrom P450.

Kata kunci: Artritis reumatoid, Kelor, *Docking*, ADME

ABSTRACT

ISNUR WAHYUNINGSIH, 2023, PREDICTION OF MORINGA BIOACTIVE COMPOUNDS (*Moringa oleifera*) AS CANDIDATES FOR RHEUMATOID ARTHRITIS THERAPY WITH *DOCKING MOLEKULER* ANALYSIS, THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, UNIVERSITAS SETIA BUDI. Supervised by Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. and apt. Dian Marlina, S.Farm., M.Sc., M.Si., Ph.D

Rheumatoid arthritis (AR) is an autoimmune inflammatory disease that attacks joint tissue. Moringa plants are predicted to have anti-inflammatory properties. Flavonoid compounds in Moringa plants are believed to have anti-inflammatory activity. The purpose of the study was to determine the prediction of interaction patterns and pharmacokinetic profiles of compounds contained in Moringa plants.

This study was conducted using molecular docking analysis method with 20 chemical compounds in moringa plants and macromolecules targeting rheumatoid arthritis (JAK3, TACE, and mPGES1). Data collection of plant compounds with KNApSAcK. Target protein identification using KEGG pathway, RCSB PDB, and journal. The parameters of the molecular docking analysis are interaction patterns, amino acid similarities, and binding pockets. Pharmacokinetic profile prediction parameters in the form of absorption, distribution, metabolism, and excretion.

The results showed that compounds from the moringa plant had interaction patterns and affinities (≤ -70), amino acid similarity, and binding pockets to the AR target protein. Niazinin, niazimicin A, niazimin A, niaazicin A, niazicinin A, ellagic acid, niazidin, epicatechin, myricetin, apigenin, kaemferol, quercetin, rhamnetin, isorhamnetin, caffeic acid, caffeoylquinic acid, and moringyne from moringa plants have amino acids Leu348 and Gly249 against TACE proteins. The chemical compounds niazimicin A, epicatechin, isorhamnetin, caffeoylquinic acid, and moringyne from the moringa plant have amino acids Glu903 and Leu905 against the JAK3 protein. None of the compounds from the moringa plant had a good interaction pattern with the mPGES1 protein. The prediction of the pharmacokinetic profile in this study was obtained from the chemical compounds caffeic acid, apigenin, caffeoylquinic acid, niazinin, and niazimicin A from moringa plants are predicted to have a good pharmacokinetic profile when viewed in physicochemical, absorbs, distribution, metabolism, and excretion parameters and all compounds do not have the ability to penetrate the blood-brain barrier and do not have inhibitory activity against cytochrome P450 enzymes.

Key words: Rheumatoid arthritis, Moringa, Docking, ADME