

ABSTRAK

Nama : Desy Nelsari
Program Studi : Farmasi
Judul : Studi *In Silico* Daun Dewandaru (*Eugenia uniflora* L.) Sebagai Anti-Tirosinase

Indonesia sebagai negara yang berada di sekitar garis ekuator memiliki iklim tropis yang dikarakterisasi dengan suhu tinggi dan radiasi sinar ultraviolet (UV) pada level tertinggi. Hiperpigmentasi merupakan suatu kondisi masalah kulit yang diakibatkan oleh peningkatan proses melanogenesis sehingga menyebabkan penggelapan warna kulit. Salah satu cara menangani hiperpigmentasi adalah melalui inhibisi melanin yaitu tirosinase. *Eugenia uniflora* L. merupakan tanaman yang memiliki senyawa metabolit kompleks yang memiliki potensi sebagai inhibitor tirosinase. Penelitian ini bertujuan untuk mencari senyawa aktif pada *Eugenia uniflora* L. yang berpotensi sebagai inhibitor enzim tirosinase yang akan dibandingkan dengan ligan natif dan asam kojat sebagai pembanding secara *in silico*. Sebelum dilakukan penambatan molekul dilakukan prediksi sifat fisikokimia yang mengacu pada parameter *Lipinski's Rule of Five*. Model protein yang digunakan yaitu 5M8O. Preparasi reseptor dan ligan menggunakan aplikasi *BIOVIA Discovery Studio*. Reseptor 5M8O dinyatakan valid karena memiliki nilai RMSD <2Å. Penambatan molekul dilakukan menggunakan aplikasi *AutoDockTools* dan *Notepad++*. Hasil menunjukan senyawa *Actinidioionosid*, β -sitosterol, *Sesquiterpen* dan α -cadinol memiliki nilai energi *binding* dan konstanta inhibisi yang rendah dibandingkan dengan ligan natif dan senyawa pembanding maka *Eugenia uniflora* L. diprediksi berpotensi untuk menghambat enzim tirosinase. Prediksi ADMET juga dilakukan menggunakan website pkCSM.

Kata Kunci: Daun Dewandaru, *In Silico*, *Molecular Docking*, Tirosinase

ABSTRACT

Name : Desy Nelsari
Study Program : Pharmacy
Title : *In Silico Study of Dewandaru Leaves (Eugenia uniflora L.) As Anti-Tyrosinase*

Indonesia as a country located around the equator has a tropical climate which is characterized by high temperatures and ultraviolet radiation (UV) at the highest level. Hyperpigmentation is a condition of skin problems caused by an increase in the process of melanogenesis, causing darkening of skin color. One way to treat hyperpigmentation is through inhibition of the key melanin synthesis enzyme, tyrosinase. *Eugenia uniflora* L. is a plant that has complex metabolite compounds that have potential as tyrosinase inhibitors. This study aims to find active compounds in *Eugenia uniflora* L. which have the potential as inhibitors of the tyrosinase enzyme to be compared with native ligands and kojic acid as in silico comparisons. Prior to molecular docking, the physicochemical properties were predicted according to Lipinski's Rule of Five parameters. The protein model used is 5M8O. Receptor and ligand preparation using the BIOVIA Discovery Studio application. The 5M8O receptor is declared valid because it has an RMSD value of $<2\text{\AA}$. Molecular docking is done using the AutoDockTools and Notepad++ applications. The results showed that the compounds Actinidioionoside, β -sitosterol, sesquiterpenes and α -cadinol had a low binding energy value and inhibition constant compared to native ligands and comparison compounds, so *Eugenia uniflora* L. was predicted to have the potential to inhibit the tyrosinase enzyme. ADMET predictions are also carried out using the pkCSM website.

Keywords: *Dewandaru Leaf, In Silico, Molecular Docking, Tyrosinase*