

ABSTRAK

Nama : Seva Adriansyah

Program Studi : S1-Farmasi

Judul : Studi *in Silico*: Analisis Efikasi dan Keamanan Senyawa Organosulfur
Umbi bawang putih (*Allium sativum* L.) Sebagai Agen Antiepilepsi
Maternal.

Epilepsi merupakan suatu kelainan neurologis paling memberatkan di dunia yang disebabkan oleh lonjakan muatan listrik di otak. Obat antiepilepsi merupakan terapi utama dalam penanganan epilepsi tetapi memiliki efek teratogenik sehingga tidak aman untuk kehamilan. Dalam penelitian *in vivo* senyawa organosulfur umbi bawang putih (*Allium sativum* L.) telah terbukti memiliki efek antikejang terhadap mencit. Penelitian dilakukan untuk menganalisis efikasi dan keamanan senyawa organosulfur umbi bawang putih sebagai agen antiepilepsi maternal melalui metode *in silico*. *Network pharmacology* dan *molecular docking* merupakan metode yang digunakan untuk mengetahui efikasi dari senyawa organosulfur umbi bawang putih sedangkan *virtual screening* dengan EmbryoTox digunakan untuk mengetahui efek teratogeniknya. Hasil analisis efikasi menunjukkan 14 dari 33 senyawa organosulfur umbi bawang putih terbukti memiliki aktivitas pada jalur GABAerik sinaps dan glutamatergik sinaps melalui interaksinya dengan 8BHM, 2OKJ, 7Y7Y, 5H8S dan 9FF0 dengan nilai energi pengikatan lebih baik dibanding *native ligand* dan diperkuat dengan adanya interaksi ikatan pada residu asam amino. Hasil analisis teratogenisitas menunjukkan 8 dari 14 senyawa organosulfur umbi bawang putih memiliki profile keamanan baik. Berdasarkan hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa 8 senyawa organosulfur yang terdiri dari (*E*)-Ajoene, (*Z*)-ajoene, Allitridin, Allyl pentasulfide, Diallyl heptasulfide, Diallyl hexasulfide, Diallyl tetrasulfide, dan Methyl 3-(methylsulfinyl)-1-propenyl disulfide berpotensi sebagai agen antiepilepsi maternal.

Kata kunci :

Epilepsi, Antiepilepsi maternal, Teratogenisitas, *In silico*

ABSTRACT

Name : Seva Adriansyah
Major : Bachelor of Pharmacy
Title : *In Silico* Study: Efficacy and Safety Analysis of Organosulfur Compounds from Garlic Bulbs (*Allium sativum* L.) as Maternal Antiepileptic Agents.

Epilepsy is the most severe neurological disorder in the world caused by surges of electrical charges in the brain. Antiepileptic drugs are the main therapy in the treatment of epilepsy but have teratogenic effects and are therefore unsafe during pregnancy. *In vivo* studies have shown that organosulfur compounds from garlic bulbs (*Allium sativum* L.) have anticonvulsant effects in mice. This study was conducted to analyze the efficacy and safety of organosulfur compounds from garlic bulbs as maternal antiepileptic agents using *in silico* methods. Network pharmacology and molecular docking are the methods used to determine the efficacy of organosulfur compounds from garlic bulbs, while virtual screening with EmbryoTox was used to determine their teratogenic effects. Results of the efficacy analysis showed that 14 of the 33 organosulfur compounds of garlic bulbs were proven to have activity on the GABAergic synapse and glutamatergic synapse pathways through their interactions with 8BHM, 2OKJ, 7Y7Y, 5H8S and 9FF0 with better binding energy values than native ligands and strengthened by the presence of binding interactions on amino acid residues. Results of the teratogenicity analysis showed that 8 of the 14 organosulfur compounds of garlic bulbs had a good safety profile. Based on the results of the study, it can be concluded that 8 organosulfur compounds consisting of (E)-Ajoene, (Z)-ajoene, Allitridin, Allyl pentasulfide, Diallyl heptasulfide, Diallyl hexasulfide, Diallyl tetrasulfide, and Methyl 3-(methylsulfinyl)-1-propenyl disulfide have the potential as maternal antiepileptic agents.

Keywords:

Epilepsy, Maternal antiepileptic, Teratogenicity, *In silico*