

ABSTRAK

Nama : Intan Ririn Setyawati
Program studi : S1 Farmasi
Judul : Studi *In Silico*: Senyawa Aktif Akar Senggugu (*Clerodendrum serratum*) terhadap Penghambatan Reseptor *Human Chitotriosidase-1* (hCHIT1) sebagai Antiasma

Asma adalah penyakit inflamasi kronik yang biasanya ditandai dengan peradangan saluran napas. Salah satu tumbuhan yang dimanfaatkan sejak dulu untuk mengobati asma adalah akar senggugu (*Clerodendrum serratum*). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa aktif akar senggugu sebagai antiasma yang dilakukan secara *in silico* meliputi prediksi *molecular docking*, sifat fisikokimia, dan prediksi toksisitas. Prediksi *molecular docking* menggunakan PLANTS, sementara sifat fisikokimia dan toksisitas menggunakan laman situs ProTox dan pkCSM. Hasil *molecular docking* menunjukkan senyawa apigenin-7-glukosida, β -Dihidrofukosterol, asam ikosahidropisenat, D-mannitol, dan asam queretaroic memiliki afinitas lebih baik dibandingkan teofilin sebagai senyawa pembanding. Berdasarkan analisis *lipinski's role of five* dari ketujuh senyawa aktif, apigenin-7-glukosida tidak memenuhi syarat *lipinski's role of five* namun masih dapat memenuhi syarat untuk digunakan sebagai senyawa obat baru dengan meningkatkan permeabilitasnya. Senyawa β -Dihidrofukosterol merupakan kandidat yang paling baik, sebab β -Dihidrofukosterol menunjukkan parameter absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi yang baik dan prediksi toksisitas β -Dihidrofukosterol masuk ke dalam kelas IV yang masih lebih aman dibandingkan obat pembanding teofilin.

Kata Kunci :

Asma, *Clerodendrum serratum*, *in silico*, *molecular docking*

ABSTRACT

Name : Intan Ririn Setyawati
Study Program : S1 Farmasi
Judul : In Silico Study: Active Compound of Senggugu Root (*Clerodendrum serratum*) on Inhibition of Human Chitotriosidase-1 (hCHIT1) Receptor as Antiasthma

Asthma is a chronic inflammatory disease that is usually characterized by airway inflammation. One of the plants that has been used for a long time to treat asthma is the root of *Clerodendrum serratum*. This study aimed to determine the potential of the active compound of senggugu root as an anti-asthma which was carried out in silico including prediction of molecular docking, physicochemical properties, and prediction of toxicity. Molecular docking prediction uses PLANTS, while physicochemical properties and toxicity uses the ProTox and pkCSM websites. Molecular docking results showed that the compounds apigenin-7-glucoside, β -Dihydrofucosterol, icosahydric acid, D-mannitol, and quercetin had better affinity than theophylline as the reference compound. Based on Lipinski's rule of five analysis, from the seven active compounds, there is apigenin-7-glucoside that does not meet the requirements for Lipinski's rule of five but can still qualify for use as new drug compounds by increasing their permeability. The compound β -Dihydrofucosterol is the best candidate, because β -Dihydrofucosterol shows good parameters of absorption, distribution, metabolism and excretion. For prediction of β -Dihydrofucosterol toxicity is in class IV which is still safer than the comparator drug theophylline. The β -Dihydrofucosterol compound is also predicted not to have mutagenic, hepatotoxic, or sensitive effects for the skin.

Keywords :

Asthma, *Clerodendrum serratum*, in silico, molecular docking