

ABSTRAK

Nama : Hana Alifah Bustami
Program Studi : 22334760
Judul : *Molecular Docking* Senyawa Aktif Daun Turnip (*Brassica rapa* L.) Sebagai Penghambat *Angiotensin-Converting Enzyme* (ACE)

Hipertensi merupakan salah satu penyebab mortalitas dan morbiditas di Indonesia yang apabila tidak terkontrol akan memperburuk terjadinya komplikasi. Penggunaan obat antihipertensi penghambat *Angiotensin-Converting Enzyme* (ACE) dapat mengontrol hipertensi dan mengurangi terjadinya komplikasi. Daun turnip (*Brassica rapa* L.) merupakan salah satu tumbuhan yang diketahui memiliki efek sebagai penghambat ACE. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa aktif daun turnip yang berpotensi sebagai penghambat ACE. Penelitian dilakukan secara *in silico* meliputi prediksi sifat fisikokimia, prediksi *molecular docking*, dan prediksi sifat farmakokinetiknya (ADME dan Toksisitas) dengan Kaptopril sebagai pembanding. Prediksi sifat fisikokimia dilakukan berdasarkan *Lipinski's rule of five* (RO5), prediksi *molecular docking* dilakukan menggunakan PLANTS, dan sifat farmakokinetik dilakukan pada situs pkCSM dan Pro Tox II. Berdasarkan analisis RO5, terdapat 16 dari 55 senyawa yang memenuhi syarat. Kemudian, dilakukan *molecular docking* dengan hasil 10 senyawa memiliki *docking score* lebih kecil daripada Kaptopril. Berdasarkan analisis sifat farmakokinetik, terdapat 2 dari 10 senyawa yang memiliki sifat farmakokinetik yang cukup baik yaitu 7,10,13 hexadecatrienoic acid, methyl ester dan Methyl tetradecanoate. Senyawa 7,10,13 hexadecatrienoic acid, methyl ester dan Methyl tetradecanoate merupakan kandidat paling baik sebagai penghambat ACE dengan *docking score* masing-masing (-82,8059) dan (-77,0105), dan kelas toksisitas masing-masing kelas 6 dan 5.

Kata Kunci :
ACEI, *Brassica rapa* L., Hipertensi, *in silico*, *molecular docking*.

ABSTRACT

Name : Hana Alifah Bustami
Study Program : 22334760
Title : *Molecular Docking* Active Compounds of Turnip Leaves (*Brassica rapa* L.) as Angiotensin-Converting Enzyme Inhibitor (ACEI)

Hypertension is one of the causes of mortality and morbidity in Indonesia, which if uncontrolled will worsen the occurrence of complications. The use of Angiotensin-Converting Enzyme (ACE) inhibitor as antihypertensive drugs can control hypertension and reduce the occurrence of complications. Turnip leaves (*Brassica rapa* L.) is one of the plants known to have an effect as ACE inhibitor. This study aims to determine the active compounds of turnip leaves that have the potential as ACE inhibitors. The research was conducted *in silico* including prediction of physicochemical properties, prediction of molecular docking, and prediction of pharmacokinetic properties (ADME and Toxicity) with Captopril as a comparison. Prediction of physicochemical properties was carried out based on Lipinski's rule of five (RO5), prediction of molecular docking was carried out using PLANTS, and pharmacokinetic properties were carried out on pkCSM and Pro Tox II sites. Based on RO5 analysis, 16 out of 55 compounds were qualified. Then, molecular docking was carried out with the results of 10 compounds having a smaller docking score than Captopril. Based on the analysis of pharmacokinetic properties, there are 2 out of 10 compounds that have fairly good pharmacokinetic properties, namely 7,10,13 hexadecatrienoic acid, methyl ester and Methyl tetradecanoate. Compounds 7,10,13 hexadecatrienoic acid, methyl ester and Methyl tetradecanoate are the best candidates as ACE inhibitor with docking score of (-82.8059) and (-77.0105) respectively, and toxicity classes 6 and 5 respectively.

Keywords :

ACEI, *Brassica rapa* L., Hypertension, *in silico*, *molecular docking*.