

ABSTRAK

Nama : Dandy Rifaldy
Program Studi : Sarjana Farmasi
Judul : Uji In-Silico Senyawa Flavonoid Herba Kumis Kucing (*Orthosiphon stamineus* B.) Sebagai Penghambat Enzim Siklooksigenase-2.

Inflamasi adalah sistem respons tubuh terhadap rangsangan yang dianggap berbahaya, namun inflamasi yang tidak tertangani akan menyebabkan inflamasi semakin memburuk. Penghambatan enzim siklooksigenase-2 (COX-2) oleh *Non Steroidal Antiinflammatory Drug* (NSAID) dapat mengurangi proses inflamasi, namun NSAID memiliki banyak efek samping negatif. Penelitian ini bertujuan menguji senyawa flavonoid herba kumis kucing (*Orthosiphon stamineus* B.) sebagai alternatif kandidat obat antiinflamasi, dengan melakukan studi in silico yang meliputi identifikasi sifat mirip obat, *molecular docking*, prediksi bioaktivitas dan prediksi sifat farmakokinetik. Dari hasil analisis didapatkan dua senyawa flavonoid herba kumis kucing (*Orthosiphon stamineus* B.) yang memiliki afinitas lebih kuat dan stabil dalam pengikatan enzim siklooksigenase-2, yakni cirsimaritin dan pilloin dengan skor *molecular docking* -79,64 dan -80,61, dibandingkan ligan alami IMN skor -78,46 dan ligan pembanding ibuprofen skor -78,05, dengan memiliki pengikatan situs aktif yang mirip yakni pada residu asam amino Ser 530. Senyawa tersebut juga memenuhi kriteria sifat mirip obat dan diprediksi >90% molekulnya dapat diabsorpsi di usus, dimetabolisme oleh CYP3A4 di hati, dan tidak menyebabkan *hepatotoxic*, sehingga cirsimaritin dan pilloin berpotensi dikembangkan lebih lanjut untuk dijadikan kandidat obat antiinflamasi.

Kata kunci: Antiinflamasi, COX-2, Flavonoid, Herba kumis kucing, In-silico.

.

ABSTRACT

Name : Dandy Rifaldy
Study Program : Bachelor Pharmacy
Title : *In-Silico Test Of Flavonoid Compound Herb Kumis Kucing (Orthosiphon Stamineus B.) As Inhibition Enzym Cyclooxygenase-2.*

Inflammation is the body's response system to stimuli considered harmful, but untraeted inflammation would get worsed. Inhibition of the cyclooxygenase-2 enzyme (COX-2) by Non-Steroidal Anti-Inflammatory Drugs (NSAIDs) can be reduce the inflammatory process, but NSAIDs have many negative side effects. This study aimed to test flavonoid compounds from the kumis kucing herb (Orthosiphon stamineus B.) as a candidate alternative anti-inflammatory drug, by conducting in silico studies including drug-likeness identification, molecular docking, bioactivity prediction, and pharmacokinetic property prediction. The analysis results identified two flavonoid compounds from kumis kucing herb (Orthosiphon stamineus B.) that had strenght and more stable affinities in binding the cyclooxygenase-2 enzyme, namely cirsimaritin and pilloin with molecular docking scores -79.64 and -80.61, compared to the native ligand IMN score of -78.46 and the reference ligand ibuprofen score -78.05, with a similar binding site on the Ser 530 amino acid residue. These compounds also met drug-like criteria and were predicted to be >90% absorbable in the intestine, metabolized by CYP3A4 in the liver, and not hepatotoxic, suggesting that cirsimaritin and pilloin have the potential to be further developed as anti-inflammatory drug candidates.

Key words: Antiinflamtory, COX-2, Flavonoid, Herb. kumis kucing, In-silico.