

ABSTRAK

VOCAY EX PELLU, 2025. ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA KANDUNGAN BROTOWALI (*Tinospora cordifolia*) TERHADAP TARGET PROTEIN ANTIINFLAMASI, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Dwi Ningsih, M.Farm.

Brotowali (*Tinospora cordifolia*) merupakan tanaman obat tradisional yang mengandung berbagai senyawa bioaktif dengan potensi aktivitas antiinflamasi. Inflamasi berperan penting dalam patogenesis berbagai penyakit, sehingga diperlukan pengembangan kandidat antiinflamasi yang efektif. Pendekatan *in silico* melalui penambatan molekuler digunakan sebagai tahap awal untuk memprediksi interaksi senyawa aktif dengan protein target yang terlibat dalam proses inflamasi. Penelitian ini bertujuan memprediksi potensi senyawa aktif brotowali sebagai kandidat antiinflamasi berdasarkan interaksinya dengan protein iNOS, LOX, dan MMP-9.

Metode penelitian meliputi penyaringan senyawa aktif brotowali berdasarkan parameter drug-likeness menggunakan *SwissADME*. Senyawa terpilih kemudian dilakukan penambatan molekuler menggunakan *PyRx* berbasis *AutoDock Vina* terhadap protein target iNOS, LOX, dan MMP-9. Validasi metode dilakukan melalui proses *redocking* ligan kristalografi. Analisis dan visualisasi interaksi ligan–protein dilakukan menggunakan *Biovia Discovery Studio*.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa tidak terdapat satu senyawa yang memiliki performa optimal pada seluruh protein target. Tinocordiside menunjukkan hasil terbaik pada protein LOX dengan persentase kesamaan pola interaksi asam amino $\geq 60\%$ serta mempertahankan interaksi dengan residu kunci Ile676. Sementara itu, tinocordifolin menunjukkan potensi terbaik pada protein MMP-9 dengan persentase kesamaan $\geq 60\%$ dan interaksi dengan residu kunci Leu188 dan Ala189. Hasil ini menunjukkan bahwa senyawa aktif brotowali berpotensi sebagai kandidat antiinflamasi yang bersifat target-spesifik.

Kata kunci : Antiinflamasi, brotowali, penambatan molekuler

ABSTRACT

VOCAY EX PELLU, 2025. MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF BROTOWALI (*Tinospora cordifolia*) COMPOUNDS TOWARDS ANTI-INFLAMMATION PROTEIN TARGETS, Thesis, Bachelor of Pharmacy Program, Faculty of Pharmacy, Universitas Setia Budi, Surakarta Supervised by Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. and apt. Dwi Ningsih, M.Farm.

Brotowali (*Tinospora cordifolia*) is a traditional medicinal plant that contains various bioactive compounds with potential anti-inflammatory activity. Inflammation plays an important role in the pathogenesis of many diseases, highlighting the need for the development of effective anti-inflammatory agents. An *in silico* approach using *Molecular docking* is commonly employed as an initial step to predict the interactions between active compounds and target proteins involved in inflammatory processes. This study aims to predict the potential of brotowali active compounds as anti-inflammatory candidates based on their interactions with iNOS, LOX, and MMP-9 proteins.

The research methods included screening brotowali active compounds based on drug-likeness parameters using SwissADME. Selected compounds were subsequently subjected to *Molecular docking* using PyRx integrated with AutoDock Vina against the target proteins iNOS, LOX, and MMP-9. Method validation was performed through *redocking* of the co-crystallized ligands. Analysis and visualization of ligand–protein interactions were carried out using BIOVIA Discovery Studio.

The results showed that no single compound exhibited optimal performance across all target proteins. Tinocordiside showed the best interaction with the LOX protein, with $\geq 60\%$ similarity in amino acid interaction patterns and preservation of the key residue Ile676. Meanwhile, Tinocordifolin demonstrated the most favorable interactions with MMP-9, with $\geq 60\%$ similarity and interactions involving the key residues Leu188 and Ala189. These findings indicate that brotowali active compounds have potential as target-specific anti-inflammatory candidates.

Keywords: Anti-inflammatory, brotowali, *Molecular docking*