

ABSTRAK

LORENSIUS GIOVANI IMANUEL 2025, STUDI *DOCKING* MOLEKULER DAN PREDIKSI PROFIL ADME TANAMAN MATOA (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst) SEBAGAI ANTIHIPERTENSI, SKRIPSI PROGRAM STUDI FARMASI FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si. dan apt. Ismi Puspitasari, S. Farm., M.Farm.

Tanaman matoa (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst) merupakan salah satu tanaman tradisional yang diketahui memiliki potensi sebagai antihipertensi. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui afinitas dan pola interaksi senyawa metabolit sekunder tanaman matoa terhadap protein target antihipertensi.

Metode *in silico* yang digunakan dalam penelitian ini adalah *docking molecular* dan prediksi profil ADME. Struktur senyawa metabolit sekunder di skrining dari jurnal di google scholar dari tanaman matoa diambil dari pubchem, kemudian dipreparasi menggunakan Biovia DS dan dilakukan optimasi struktural terhadap ligan menggunakan PyRx: Openbabe. Protein target antihipertensi diambil dari situs PDB. Protein target dipreparasi dengan menggunakan Biovia DS untuk menghapus air, ion, ligan asli, dan penambahan atom hidrogen. Dilakukan validasi *docking* menggunakan Yasara. *Docking* antara ligan dan protein target dilakukan menggunakan PLANTS1.2. Pada Penelitian ini juga dilakukan Prediksi profil ADME dari senyawa tanaman matoa menggunakan ADMETlab3.0.

Hasil penelitian menunjukkan dari sebelas senyawa tanaman matoa empat senyawa memiliki pola interaksi dan afinitas yang baik menyerupai native ligan antihipertensi ACE dan AT1 yaitu Kampferol-3-O-glukosida, Kaempferol-3-O-rutinoside, Quercetin-3-O-glucoside, dan Quercetin-3-O-rhamnoside. Prediksi profil ADME keempat senyawa tidak memiliki kemampuan menembus sawar darah otak. Keempat senyawa memiliki absorpsi yang baik pada plasma darah tapi tidak pada jaringan, difusi pasif yang buruk tetapi difusi aktif yang baik, tidak melewati *first pass* metabolisme di usus dan hati, obat dengan efek kerja cepat.

Kata Kunci : Matoa (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst), *Docking* Molekuler, Hipertensi, Prediksi Profil ADME.

ABSTRACT

LORENSIUS GIOVANI IMANUEL 2025, MOLECULAR DOCKING STUDY AND ADME PROFILE PREDICTION OF MATOA PLANT (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst) AS AN ANTIHYPERTENSIVE, THESIS FOR THE PHARMACY STUDIES PROGRAM, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. Nuraini Harmastuti, S.Sc., M.Si. and Ismi Puspitasari, S. Farm., M.Farm.

Matoa plant (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst) is one of the traditional plants known to have potential as an antihypertensive. The aim of this study is to determine the affinity and interaction pattern of secondary metabolite compounds from the matoa plant with antihypertensive target proteins.

The *in silico* methods used in this study are molecular docking and ADME profile prediction. The structure of secondary metabolite compounds was screened from journals on Google Scholar from the matoa plant, taken from PubChem, then prepared using Biovia DS and structural optimization of the ligand was carried out using PyRx: Openbabe. The antihypertensive target protein was obtained from the PDB site. The target protein was prepared using Biovia DS to remove water, ions, original ligands, and to add hydrogen atoms. Docking validation was performed using Yasara. Docking between the ligand and target protein was carried out using PLANTS1.2. This study also performed ADME profile prediction of matoa plant compounds using ADMETlab3.0.

Research results show that out of eleven compounds from the matoa plant, four compounds exhibit good interaction patterns and affinities similar to the native antihypertensive ligands ACE and AT1, namely Kaempferol-3-O-glucoside, Kaempferol-3-O-rutinoside, Quercetin-3-O-glucoside, and Quercetin-3-O-rhamnoside. From the predicted ADME profile, the four compounds do not have the ability to cross the blood-brain barrier. The four compounds have good absorption in the blood plasma but not in tissues, poor passive diffusion but good active diffusion, do not undergo first-pass metabolism in the intestines and liver, and are drugs with a rapid action effect.

Key Words : Matoa (*Pometia pinnata*, J.R. Forst. & G. Forst), Molecular Docking, Hypertension, Prediction Of Its ADME Profile