

**STUDI *DOCKING* MOLEKULER DAN PREDIKSI PROFIL ADME
TANAMAN MATOA (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst)
SEBAGAI ANTIHIPERTENSI**



**Diajukan oleh:
Lorensius Giovani Imanuel
27216496A**

**Kepada
FAKULTAS S1 FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
Agustus 2025**

**STUDI *DOCKING* MOLEKULER DAN PREDIKSI PROFIL ADME
TANAMAN MATOA (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst)
SEBAGAI ANTIHIPERTENSI**



*Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
derajat Sarjana Farmasi (S.Farm)
Program Studi Ilmu Farmasi Pada Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi*

**Diajukan oleh:
Lorensius Giovani Imanuel
27216496A**

**Kepada
FAKULTAS S1 FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
Agustus 2025**

PENGESAHAN SKRIPSI

Berjudul :
**STUDI *DOCKING* MOLEKULER DAN PREDIKSI PROFIL ADME
TANAMAN MATOA (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst)
SEBAGAI ANTIHIPERTENSI**

Oleh :
**Lorensius Giovani Imanuel
27216496A**

Dipertahankan dihadapan Panitia Penguji Skripsi
Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi
Pada tanggal : 11 Agustus 2025

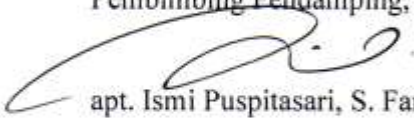
Mengetahui,
Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi
Dekan,

Dr. apt. Iswandi, M.Farm.

Pembimbing,


Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si.

Pembimbing Pendamping,

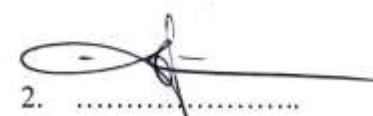

apt. Ismi Puspitasari, S. Farm., M.Farm.

Penguji:

1. Dr. apt. Rina Herowati, M.Si.

1. 
.....

2. apt. Dwi Ningsih, M.Farm.

2. 
.....

3. apt. Jena Hayu Widyasti, M.Farm.

3. 
.....

4. Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si.

4. 
.....

HALAMAN PERSEMBAHAN

“Halangan bagi tindakan akan mendorong tindakan. Apa yang menghalangi jalanmu akan menjadi jalan itu sendiri.”

Marcus Aurelius

Skripsi ini saya persembahkan kepada:

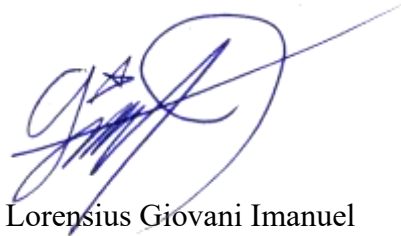
1. Tuhan YME yang senantiasa melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya dari awal saya mengerjakan skripsi ini sampai selesai, yang telah memberikan saya keteguhan, kekuatan, dan ketabahan melewati semua halangan, kesengsaraan, rintangan, dan segala keterbatasan saya untuk menyelesaikan skripsi ini dari penelitian sampai ujian akhir skripsi.
2. Mama dan Bapak saya yang tercinta, terimakasih atas segala dukungan dan kepercayaan kepada saya, serta atas pengorbanan yang diberikan agar saya bisa berkuliah sampai selesai sekarang
3. Kepada teman-teman saya Claudia Mete, Calvin Alvian Nugroho Panjaitan, Rama Benyamin Rogi. P, Yohanis Piter, Dicky P. Kalinggoru, Mohammad Jakfar, dan Fernaldy Hitijahubessy.
4. Semua teman-teman yang tidak bisa disebutkan satu persatu saya ucapkan terimakasih atas semuanya semoga sukses selalu, lancar dalam segala yang dilakukan, dan semuanya bisa mencapai cita-cita yang ingin dicapai.
5. Semua pihak yang tidak bisa disebutkan satu per satu, terimakasih atas dukungan-nya dalam proses pengerjaan skripsi saya.
6. Marcus Aurelius, Kaisar Romawi dan filsuf Stoa, yang melalui pemikiran-nya mengajarkan bahwa kebijaksanaan lahir dari ketabahan dan pengendalian diri.
7. Filsafat Stoa, warisan Zeno dari Citium dan para penerusnya yang mengajarkan bahwa kebajikan adalah kebaikan tertinggi, bahwa penderitaan dapat ditempa menjadi kekuatan, dan bahwa ketenangan jiwa dapat ditemukan bahkan di tengah keterbatasan hidup.

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini adalah hasil pekerjaan saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Apabila skripsi ini terdapat jiplakan dari penelitian/karya ilmiah/skripsi orang lain, maka saya siap menerima sanksi, baik secara akademis maupun hukum.

Surakarta, Agustus 2025



Lorensius Giovani Imanuel

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Tuhan YME, karena atas rahmat, karunia, dan pertolongan-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul: “Studi *Docking* Molekuler dan Prediksi Profil ADME Tanaman Matoa (*Pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst) sebagai Antihipertensi”.

Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi pada Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi Surakarta.

Dalam kesempatan ini, penulis menyampaikan rasa terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Tuhan YME yang senantiasa melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya.
2. Kedua orang tua tercinta atas doa, dukungan, kasih sayang, dan pengorbanan yang tidak ternilai.
3. Ibu Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si. dan Ibu apt. Ismi Puspitasari, S. Farm., M.Farm. selaku dosen pembimbing, atas bimbingan, arahan, dan kesabaran dalam membimbing penulis.
4. Bapak/Ibu dosen Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi Surakarta atas ilmu dan nasihat yang telah diberikan.
5. Teman-teman serta semua pihak yang telah memberikan dukungan, semangat, dan bantuan dalam penyusunan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu, kritik dan saran yang membangun sangat penulis harapkan. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya di bidang farmasi.

Surakarta, 27 agustus 2025
Penulis

Lorensius Giovanni Imanuel

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PENGESAHAN SKRIPSI.....	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iii
PERNYATAAN	iv
KATA PENGANTAR	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
DAFTAR SINGKATAN	xii
ABSTRAK	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan masalah.....	3
C. Tujuan penelitian	3
D. Manfaat penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	4
A. Matoa (<i>Pometia pinnata</i> J.R. Forst. & G. Forst).....	4
1. Klasifikasi Tanaman Matoa	4
2. Kandungan Kimia dan Aktivitas Farmakologi Tanaman Matoa	4
B. Hipertensi	6
1. Defini Hipertensi	6
2. Prevalensi Hipertensi.....	6
3. Representasi Klinis Hipertensi	7
4. Patofisiologi Hipertensi.....	8
5. Diagnosis dan Pengobatan Hipertensi	9
6. Mekanisme Anti-hipertensi	11
C. Molekuler <i>Docking</i> dan Profil Farmakokinetika.....	18
1. Molekuler <i>Docking</i>	18
2. Farmakokinetika	19
E. Metode Uji Menggunakan Molekuler <i>Docking</i>	21
F. Protein Target	24
1. Angiotensin Converting Enzyme (ACE).....	24
2. Reseptor Angiotensin II Type 1 (AT1)	26

G.	Metode Uji Profil Farmakokinetika ADME.....	29
H.	Parameter ADMETlab 3.0.....	31
	1. Absorpsi.....	31
	2. Distribusi	34
	3. Metabolisme	35
	4. Eksresi	36
I.	Webserver & Software	36
	1. Pubchem	36
	2. SwissADME.....	37
	3. RCSB PDB	37
	4. Yasara	37
	5. PyRx: Openbable.....	38
	6. PLANTS1.2 (<i>Protein-ligan ANT System version 1.2</i>).....	38
	7. Pymol.....	38
	8. BIOVIA Discovery Studio Visualizer	39
	9. Ligplot+	39
	10. ADMETlab 3.0.....	39
J.	Landasan Teori	40
K.	Hipotesis.....	41
BAB III METODE PENELITIAN		42
A.	Populasi dan Sampel	42
B.	Variabel Penelitian.....	42
	1. Identifikasi Variabel Utama	42
	2. Klasifikasi Variabel Utama	42
	3. Definisi Operasional Variabel Utama	43
C.	Bahan dan Alat	43
	1. Bahan.....	43
	2. Alat	44
D.	Jalannya Penelitian.....	44
	1. Pengumpulan senyawa metabolit sekunder.....	44
	2. Preparasi ligan Tanaman Matoa.....	44
	3. Pencarian protein target	44
	4. Validasi Metode <i>Docking</i>	45
	4.1 Preparasi protein.....	45
	4.2 Preparasi native ligan	45
	4.3 Proses <i>docking</i>	46
	4.4 Perhitungan RMSD	48
	5. Proses <i>Docking</i>	48

6. Analisis visualisasi	48
7. Parameter Profil ADME	49
E. Analisis Data	49
F. Skema Penelitian	51
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	52
A. Screening dan Preparasi Ligan Uji Tanaman Matoa	52
B. Screening dan Preparasi Protein Target	56
C. Hasil Validasi Metode	56
1. Protein ACE	57
2. Protein AT1	60
D. Hasil <i>Docking</i> Tanaman Matoa Pada Protein Target	62
1. Analisis <i>Energy binding</i> dan Analisis Visualisasi Dari Senyawa Uji Tanaman Matoa Terhadap Protein ACE	62
2. Analisis <i>Energy binding</i> dan ikatan asam amino dari senyawa uji tanaman matoa terhadap protein AT1	69
E. Korelasi ΔG <i>binding</i> dan Persentase Asam Amino	75
F. Prediksi ADME	78
BAB V KESIMPULAN	89
DAFTAR PUSTAKA	90
LAMPIRAN	97

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 1 . Klasifikasi tekanan darah pada orang dewasa	6
Tabel 2 . Parameter ADMETlab 3.0	50
Tabel 3 . Kandungan senyawa metabolit sekunder dalam tanaman matoa dan struktur kimianya.....	52
Tabel 4 . RMSD dari docking native ligan 1O86	57
Tabel 5 . RMSD dari <i>docking native</i> ligan 1O86 4ZUD	60
Tabel 6 . ΔG <i>binding</i> dari <i>docking</i> ligan uji pada protein target ACE..	62
Tabel 7 . Ikatan ligan & protein 1O86	63
Tabel 8 . ΔG <i>binding</i> dari <i>docking</i> ligan uji pada protein target AT1 ...	69
Tabel 9 . Ikatan ligan & protein 4ZUD.....	70
Tabel 10 . Ringkasan ΔG <i>binding</i> dan persentase asam amino	75
Tabel 11 . Hasil prediksi fisikokimia senyawa tanaman matoa.....	78
Tabel 12 . Hasil prediksi absorpsi senyawa tanaman matoa.....	80
Tabel 13 . Hasil prediksi distribusi senyawa tanaman matoa	83
Tabel 14 . Hasil prediksi metabolisme senyawa tanaman matoa	85
Tabel 15 . Hasil prediksi eksresi senyawa tanaman matoa	87

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 1 . Tanaman Matoa (<i>Pometia pinnata</i> J.R. Forst. & G. Forst)..	4
Gambar 2 . Patofisiologi Hipertensi	9
Gambar 3 . Mekanisme obat Antihipertensi	12
Gambar 4 . Interaksi ACE dengan ligan asli dari Biovia DS	25
Gambar 5 . Interaksi ACE dengan ligan (Natesh et al.,2004)	26
Gambar 6 . Interaksi AT1 dengan ligan dari Biovia DS	27
Gambar 7 . Interaksi AT1 dengan ligan (Zhang et al., 2015)	28
Gambar 8 . Skema Penelitian	51
Gambar 9 . <i>Native</i> ligan 1O86 sebelum dan sesudah <i>docking</i>	58
Gambar 10 . <i>Native</i> ligan 4ZUD sebelum dan sesudah <i>docking</i>	61
Gambar 11 . <i>Native</i> ligan lisinopril dan nicotiflorin.....	65
Gambar 12 . <i>Native</i> ligan lisinopril dan isoquercetin.....	66
Gambar 13 . <i>Native</i> ligan lisinopril dan quercitrin.....	68
Gambar 14 . <i>Native</i> ligan Olmesartan dan astragalin	72
Gambar 15 . <i>Native</i> ligan Olmesartan dan isoquercetin	73
Gambar 16 . <i>Native</i> ligan Olmesartan danquercitrin.....	74
Gambar 17 . Korelasi $\Delta G_{\text{binding}}$ dan persentase asam amino (1086 & 4ZUD).....	76

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1. Pengunduhan protein target dengan RCSB PDB	97
Lampiran 2. Identifikasi senyawa tanaman matoa dari beberapa jurnal di google scholar	98
Lampiran 3. Pengunduhan file SDF dan pengambilan kode smile ligan uji.....	98
Lampiran 4. Preparasi ligan & protein dengan Biovia DS	99
Lampiran 5. Optimasi struktur dengan Pyrx:Openbabel	100
Lampiran 6. Visualisasi dan penentuan gridball dengan Pymol.....	101
Lampiran 7. Proses Docking dengan PLANTS 1.2.....	102
Lampiran 8. Validasi metode dengan Yasara	103
Lampiran 9. Visualisasi dengan ligpplot+	104
Lampiran 10. Prediksi ADME dengan ADMETlab 3.0	105

DAFTAR SINGKATAN

Å	Angstrom
ACD	<i>Academic Compound Guidelines</i>
ACE	<i>angiotensin-converting enzym</i>
ADME	Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Eksresi
ARB	<i>Angiotensin Receptor Blocker</i>
ASCVD	<i>arteriosclerotic cardiovascular disease</i>
AT1	Angiotensin II tipe 1
AV	Atrioventricular
CMC	<i>Comprehensive Medicinal Chemistry</i>
CV	<i>Curriculum Vitae</i>
eNOS	<i>endothelial nitric oxide synthase</i>
HF	<i>Heart Failure</i>
MDDR	<i>MDL Drug Data Report</i>
MPP	<i>Matoa Peel Powder</i>
NEP	Neutral endopeptidase (Neprilysin)
PGK	Penyakit Ginjal Kronis
RAAS	<i>Renin-Angiotensin-Aldosteron System</i>
RAAS	Sistem Renin-Angiotensin-Aldosteron
SIHD	<i>Stable Ischemic Heart Disease</i>
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry System
TD	Tekanan Darah
TDD	Tekanan Darah Diastolik
TDS	Tekanan Darah Sistolik

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: Openable. 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

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Berdasarkan riset yang dilakukan oleh departemen kesehatan Indonesia, menurut Survei Kesehatan Indonesia (SKI) 2023 dan studi kohor penyakit tidak menular (PTM) pada periode 2011-2021 hipertensi adalah salah satu faktor risiko tertinggi penyebab kematian di Indonesia pada posisi keempat dengan persentase 10,2%. Data SKI 2023 menunjukkan bahwa hipertensi sebanyak 22,2% adalah penyebab disabilitas (melihat, mendengar, berjalan) pada 59,1% penduduk berusia 15 tahun ke atas di mana sebanyak 53,5% dan penyakit tersebut adalah PTM.

Penyakit hipertensi dapat disebabkan oleh etiologi yang tidak diketahui (primer atau hipertensi esensial) atau dari suatu penyebab tertentu (hipertensi sekunder). Hipertensi sekunder (<10% kasus) biasanya disebabkan oleh penyakit ginjal kronis (PGK) atau penyakit renovaskular. Kondisi lain yang dapat menyebabkan hipertensi adalah sindrom cushing, koarktasi aorta (penyempitan aorta jantung atau pembuluh darah utama dan paling besar), apnea tidur obstruktif, hiperparatiroidisme, pheochromocytoma, aldosteronisme primer, hipertiroidisme, penggunaan obat-obat tertentu (Dipiro *et al.*, 2023).

Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh (Purwidyaningrum *et al.*, 2017) ekstrak dan fraksi dari daun matoa (*pometia pinnata* J.R. Forst. & G. Forst) ditemukan bahwa daun matoa memiliki efek untuk menurunkan tekanan darah (antihipertensi) terhadap tikus yang diinduksi NaCl-prednisolone untuk mensimulasikan efek hipertensi, akan tetapi efek yang ditemukan tidak linear atau berbanding lurus dengan dosis yang diberikan dan tidak mengurangi produksi kolagen pada miokardium jantung. Pada penelitian yang telah dilakukan (Elisa *et al.*, 2020) ditemukan bahwa senyawa flavonoid (*Quercetin-3-O-rhamnoside*) dapat memberikan efek penurunan tekanan darah pada tikus yang diinduksi dengan angiotensin II. Berdasarkan penelitian dosis terapi yang paling efektif untuk ekstrak daun matoa dalam menurunkan tekanan darah adalah 300mg/kgBB tikus.

Studi mengenai tanaman matoa sebagai antihipertensi kebanyakan dilakukan secara *in vivo*, belum ada studi yang dilakukan secara *in silico* seperti *docking molecular* untuk mengetahui pola

interaksi dan affinitas antara ligan dengan protein target sebagai antihipertensi. *Docking molekuler* meliputi menemukan model pengikatan yang paling bagus dari ligan ke target yang diminati. (Morris & Lim-wilby,2008). *Molecular docking* merupakan salah metode *in silico* yang bisa digunakan untuk memperkirakan hubungan dan afinitas antara salah satu ligan dengan suatu makromolekul (protein) dengan cara memposisikan pada tempat tertentu, pada struktur protein target (structure based) dengan dikomputasi menggunakan software atau webserver. Kegunaan *molecular docking* adalah untuk mengetahui interaksi antara ligan atau senyawa dengan protein target. *Docking* ligan dan protein bertujuan untuk memahami dan memprediksi kemungkinan adanya ikatan molekul, afinitas dari suatu ikatan, dan interaksi obat dengan asam amino yang terdapat pada protein target (Dewi *et al.*,2023). Dari penelitian yang dilakukan oleh (Elisa *et al.*,2020) diketahui bahwa secara *in vivo* senyawa dalam tanaman matoa bekerja dengan mempengaruhi angiotensin II oleh karena itu dipilih reseptor Angiotensin II tipe 1 (AT1). Dipilih protein Angiotensi Converting Enzim (ACE) karena Angiotensin I akan diubah menjadi angiotensin II oleh ACE dari paru-paru. Angiotensin II akan menyebabkan penyempitan pembuluh darah dan meningkatkan pelepasan aldosteron dari kelenjar adrenal, yang kemudian mengakibatkan reabsorpsi natrium. Akibatnya, hormon antidiuretik dari kelenjar hipofisis juga akan ikut dilepaskan untuk menyebabkan reabsorpsi air. Jika keduanya digabungkan, maka akan memberikan efek peningkatan volume darah dan tekanan darah (Adua.2022). Penelitian *molecular docking* ini dipilih software PLANTS1.2, pymol, Yasara dan Biovia Discovery Studio dikarenakan biaya yang ekonomis sederhana untuk digunakan serta bisa digunakan dengan baik pada perangkat keras yang tersedia.

Studi farmakokinetika tanaman matoa dilakukan untuk mengetahui apakah obat bisa masuk ke dalam tubuh dan melalui proses ADME dengan baik sebelum akhirnya terikat pada reseptor yang ditargetkan. Dalam kefarmasian pemahaman mengenai farmakokinetik menjadi landasan yang sangat penting dalam pengembangan obat, pemilihan dosis yang tepat, serta pemahaman terhadap efek dan interaksi obat dalam tubuh manusia. Konsep dasar ilmu farmakokinetik, yang meliputi proses absorpsi, distribusi, metabolisme, dan eliminasi (ADME) obat dalam tubuh manusia (Salman *et al.*,2024).

Oleh karena itulah prediksi profil farmakokinetika adalah metode *in silico* yang penting untuk dilakukan dalam penelitian setelah dilakukan prediksi afinitas dan pola interaksi dari hasil metode *Docking molecular* dengan senyawa metabolit sekunder dalam tanaman matoa protein target antihipertensi, webserver ADMETlab 3.0 dipilih pada penelitian ini karena sederhana dan ekonomis untuk digunakan.

B. Rumusan masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka didapatkan rumusan masalah seperti berikut:

Pertama, bagaimana afinitas dan pola interaksi metabolit sekunder dalam tanaman matoa terhadap protein target dalam aktivitas sebagai antihipertensi terutama pada protein target ACE dan AT1 menggunakan metode *docking molekuler*?

Kedua, bagaimana prediksi profil absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi dari senyawa metabolit sekunder tanaman matoa?

C. Tujuan penelitian

Berdasarkan rumusan masalah tersebut maka tujuan dari penelitian ini seperti berikut:

Pertama, untuk memahami afinitas dan pola interaksi metabolit sekunder dalam tanaman matoa terhadap protein target sebagai antihipertensi terutama pada protein target ACE dan AT1 menggunakan metode *molekuler docking*.

Kedua, untuk memahami profil absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi dari senyawa metabolit sekunder tanaman matoa.

D. Manfaat penelitian

Manfaat yang bisa didapatkan dari penelitian ini adalah untuk menambah wawasan tentang afinitas dan pola interaksi tanaman matoa terhadap protein target ACE dan AT1 serta prediksi profil absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi senyawa metabolit sekunder dalam tanaman matoa.