

RINGKASAN

STUDI TOKSISITAS SECARA *IN SILICO* KANDUNGAN SENYAWA FLAVONOID DAN ALKALOID PADA DAUN

Justicia gendarussa Burm. f.

AISHA ASTARI EKAPUTRI

Dari hasil penelitian diketahui bahwa dalam fraksi *n*-butanol gendarusa terdapat 12 komponen flavonoid dengan komponen mayor 6,8-di- α -l-arabinopiranosil-4',5,7-trihidroksiflavon, yang kemudian dikenal dengan gendarusin A. Selain gendarusin A, masih ada komponen lainnya antara lain gendarusin B, gendarusin C, gendarusin D dan gendarusin E yang telah diketahui strukturnya. Senyawa – senyawa tersebut masuk dalam golongan flavonoid yang memiliki dua gugus gula yang terikat pada atom C nomor 6 dan atom C nomor 8. Alkaloid yang telah diisolasi dari daun *Justicia gendarussa* Burm.f.yaitu 2-amino benzil alkohol; 2-amino-o-metil benzil alkohol; 2-(2'-amino-benzilamino) benzil alkohol; 2-(2'-amino-benzil)-o-metil-benzil alkohol dan beberapa senyawa yang termasuk golongan alkaloid baru yang diisolasi pada daun *J. gendarussa*, antara lain: Justidrusamid A, Justidrusamid B, Justidrusamid C, dan Justidrusamid D.

Uji praklinik yang telah dilakukan membuktikan bahwa daun *J. gendarussa* tidak berpotensi sebagai toksik. Tetapi, menurut laporan *Food and Drug Administration (FDA)* dalam *Poisonous Plant Database (Plant List)*, tanaman gendarusa termasuk salah satu tanaman yang potensial beracun.

Penelitian ini bertujuan untuk menginformasikan bahwa kandungan senyawa gendarusin A; B; C; D; ;dan E, justidrusamid A; B; C; dan D, serta alkaloid, yaitu 2-amino benzil alkohol; 2-amino-o-metil benzil alkohol; 2-(2'-amino-benzilamino) benzil alkohol; 2-(2' amino-benzil)-o-metil-benzil alkohol dalam *Justicia gendarussa* Burm. f yang memberi potensi sebagai senyawa toksik dan menentukan Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas antara sifat fisikokimia dari senyawa yang sudah terisolasi dari *J. gendarussa* dengan prediksi toksisitasnya secara *in silico*.

Dengan metode uji *in silico* yang memanfaatkan teknologi komputasi, dapat diketahui senyawa yang menyebabkan toksisitas pada *J.*

gendarussa melalui *software* komputer. Penelitian ini dilakukan dengan menentukan sifat kimia fisika yang kemudian di prediksi toksisitasnya menggunakan dua *software online* yaitu *ACD/I-Lab*, *Osiris Property Explorer* dan *software offline* yaitu *ToxTree*.

Dari hasil penelitian menggunakan *software online ACD/I-Lab* diketahui kandungan senyawa flavonoid turunan apigenin berpotensi memiliki efek buruk yang dapat mempengaruhi *Health Effects*. Selain menggunakan *software online* tersebut, digunakan juga *Osiris Property Explorer* didapatkan urutan senyawa yang memiliki nilai *drug score* dari yang paling baik menuju paling buruk adalah Justidrusamid B > Justidrusamid A > 2-(2'-amino-benzil)-o-metil-benzil alkohol > 2-amino-o-metil benzil alkohol > Justidrusamid D > 2-(2'-amino-benzilamino) benzil alkohol > Justidrusamid C > 2-amino benzil alkohol > Gendarusin A = Gendarusin B = Gendarusin C = Gendarusin D = Gendarusin E. Senyawa yang memiliki *drug score* paling baik, mempunyai potensi baik sebagai kandidat obat baru. Prediksi toksisitas menggunakan *software offline Toxtree* didapatkan senyawa alkaloid 2-amino benzil alkohol dan 2-(2'-amino-benzilamino)benzil alkohol memiliki sifat karsinogen.

Pada Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas, LogP digunakan sebagai parameter hidrofobik, MR sebagai parameter sterik dan energi minimum sebagai parameter elektronik. Nilai-nilai parameter tersebut dihubungkan dengan toksisitas LD_{50} (*Mouse Oral*) lalu diolah menggunakan program SPSS dan didapatkan delapan persamaan regresi. Terdapat hubungan linier antara toksisitas LD_{50} dengan parameter lipofilik, elektronik, dan sterik serta diketahui bahwa parameter yang paling berpengaruh adalah parameter lipofilik. Korelasi antara toksisitas LD_{50} (*Mouse Oral*) dengan logP menyatakan bahwa semakin rendah nilai logP, maka toksisitasnya semakin besar.

ABSTRACT

***IN SILICO* STUDY FOR TOXICITY OF FLAVONOID AND ALKALOID COMPOUNDS IN *Justicia gendarussa* Burm.f.**

Five flavonoid compounds were found in *J.gendarussa* that had been structurally identified as gendarusin A, B, C, D, E and some of the alkaloid compounds were 2-aminobenzyl alcohol; 2-amino-o-methyl benzyl alcohol; 2-(2'-amino-benzylamino) benzyl alcohol; 2-(2'-amino-benzyl)-o-methyl-benzyl alcohol and also four new alkaloids had been identified as Justidrusamide A, B, C and D. The study aims to investigate which compounds are potentially toxic from the 13 compounds by *in silico* study. The method used in this study was *in silico* using ACD/I-Lab online and Osiris Property Explorer online and the offline program used was Toxtree. The results of ACD/I-Lab program showed that the flavonoid compounds had poorly effects in the health effects test. In the Osiris Property, it showed that Justidrusamide B had a good drug score. In the offline program, Toxtree, it showed that the alkaloid compounds 2-aminobenzyl alcohol and 2-(2'-amino-benzylamino) benzyl alcohol had carcinogenicity. In the quantitative relationship of Structure-Activity that were processed using SPSS program used three parameters, lipophilic, electronic and steric. There was a linear correlation between *in silico* toxicity and lipophilic parameters, the equation expresses that the lipophilic parameters which is logP has a meaningful linear correlation toxicity.

Keywords : *Justicia gendarussa* Burm.f., *in silico*, toxicity, gendarusin, justidrusamide, amino benzyl, QSAR