

ABSTRAK

Judul : Studi Anti-Alzheimer dari Tanaman *Ginkgo biloba* L. secara *in-Silico* sebagai Penghambat Kolinesterase
Nama : Sherlyna Theresia
Program Studi : Farmasi

Tanaman *Ginkgo biloba* L. diketahui memiliki potensi dalam pengobatan penyakit Alzheimer, namun mekanisme kerja dan manfaatnya pada pengobatan penyakit Alzheimer masih kontroversial. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi anti-alzheimer senyawa aktif tanaman *Ginkgo biloba* L. yaitu bilobalida, ginkgolida A, ginkgolida B, ginkgolida C, isorhamnetin, kaempferol, kuersetin, asam ginkgolik, rutin dan mirisetin secara *in-silico* melalui metode penambatan molekuler menggunakan pembandingan donepezil. Penelitian juga bertujuan memprediksi sifat mirip obat dan profil farmakokinetik menggunakan SwissADME, serta toksisitas menggunakan ProTox-II. Hasil penambatan molekuler dari bilobalida, ginkgolida A, ginkgolida B, ginkgolida C, isorhamnetin, kaempferol, kuersetin, asam ginkgolik, rutin dan mirisetin didapatkan nilai energi afinitas, yaitu -8,274; -8,250; -7,702; -8,032; -9,358; -9,978; -10,374; -9,241; -9,500; dan -10,027 kkal/mol. Residu Ser203 dan His447 merupakan residu pada sisi aktif AChE yang berperan dalam hidrolisis ACh. Bilobalida, ginkgolida A, ginkgolida B, kaempferol, kuersetin, asam ginkgolik dan mirisetin terikat pada residu Ser203. Sedangkan, residu His447 terdapat pada semua ligan uji kecuali ginkgolida C dan rutin. Berdasarkan hasil analisis nilai energi afinitas dan visualisasi interaksi, maka kuersetin, asam ginkgolik dan mirisetin memiliki potensi sebagai penghambat kolinesterase dibandingkan ketujuh ligan uji lainnya. Berdasarkan sifat mirip obat, terdapat lima ligan uji yang tidak melanggar aturan Lipinski maupun aturan Veber, salah satunya adalah kuersetin. Data farmakokinetik menunjukkan kesepuluh ligan uji tidak mengalami permeasi ke sawar darah otak, namun terdapat enam ligan uji dengan penyerapan gastrointestinal yang tinggi, dua di antaranya adalah kuersetin dan asam ginkgolik. Berdasarkan prediksi toksisitas, bilobalida, kuersetin dan mirisetin memiliki nilai LD₅₀ yang rendah, yaitu 90, 159 dan 159 mg/kg BB.

Kata kunci:

Penyakit Alzheimer, donepezil, Ginkgo biloba L., *penghambat kolinesterase, in-silico*