

## ABSTRAK

Judul : Studi *In-silico* Penghambat *Catechol-O-Methyltransferase* (COMT) Untuk Penyakit Parkinson dari Senyawa Aktif Tanaman Manggis (*Garcinia mangostana* L.)  
Nama : Venny  
Program Studi : Farmasi

Senyawa Xanthon yang terkandung pada tanaman Manggis (*Garcinia mangostana* L.) diprediksi memiliki potensi sebagai obat antiparkinson. Senyawa ini memiliki efek farmakologis salah satunya adalah aktivitas antineurogeneratif terhadap beberapa penyakit seperti alzheimer dengan menghambat enzim asetikolinesterase (AchE). Penelitian ini bertujuan untuk mencari penghambat *Catechol-O-Methyltransferase* dari senyawa xanthon yang terkandung dalam tanaman manggis yaitu  $\alpha$ -mangostin,  $\gamma$ -mangostin, 3-Isomangostin, Gartanin, Garcinone C, Garcinone D, Mangostanol, 8-Deoxygartanin, dan Garciniafuran secara *in-silico* melalui metode penambatan molekuler dan simulasi dinamika molekuler. Parameter penilaian meliputi nilai Nilai energi afinitas ( $\Delta G$ ), dan kesamaan interaksi yang langsung didapatkan dari hasil penambatan dan RMSD dan RMSF yang didapatkan dari simulasi dinamika molekuler. Hasil Penelitian menunjukkan bahwa hasil penambatan molekuler dari Garciniafuran,  $\gamma$ -mangostin, dan mangostanol memiliki nilai energi afinitas yang lebih baik dibandingkan entacapone masing-masing yaitu -8,032 kkal/mol, -7,057 kkal/mol, dan -7,051 kkal/mol dan memiliki interaksi yang sama dengan entacapone pada garciniafuran dan mangostanol terhadap residu Asn 170, sedangkan  $\gamma$ -mangostin berinteraksi dengan Asn 170 dan Lys 144. Pada hasil simulasi dinamika molekuler selama 50 ns interaksi senyawa garciniafuran  $\gamma$ -mangostin dan mangostanol memiliki stabilitas yang serupa dengan entacapone dengan nilai RMSD 0,129 nm, 0,097 nm dan 0,118 nm dan interaksi reseptor COMT dengan senyawa garciniafuran,  $\gamma$ -mangostin dan mangostanol menunjukkan adanya interaksi yang stabil pada setiap residu asam amino kunci karena tidak terjadi fleksibilitas yang tinggi.

**Katar kunci:** Penyakit parkinson, *Garcinia mangostana* L, *Catechol-O-Methyltransferase*, *in-silico*