

Penapisan In Silico basis data senyawa tanaman obat di Indonesia dan uji In Vitro aktivitas penghambatan elastase daun *Melaleuca leucadendron* L.

Munawarohthus Sholikha, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20329543&lokasi=lokal>

Abstrak

Penghambatan aktivitas elastase dapat diterapkan sebagai metode untuk melindungi terhadap penuaan kulit. Penelitian ini dilakukan untuk memperoleh tanaman Indonesia yang memiliki potensi sebagai inhibitor elastase menggunakan penapisan virtual dengan piranti lunak penambatan molekul AutoDock. Penapisan virtual dari 1406 senyawa dari basis data senyawa tanaman obat di Indonesia terhadap penghambatan elastase diperoleh peringkat tertinggi yakni senyawa leucadenon A-D. Pengujian secara in vitro terhadap penghambatan elastase dilakukan terhadap ekstrak dan fraksi daun *Melaleuca leucadendron* L. yang mengandung senyawa leucadenon A-D yang menempati peringkat 5 besar teratas dari hasil penapisan virtual. Daun segar *M. leucadendron* L. diekstraksi secara maserasi dengan pelarut aseton kemudian difraksinasi dengan kloroform. Fraksi kloroform difraksinasi kembali menggunakan kromatografi cair vakum sehingga didapatkan 6 fraksi (A-F) yang digabungkan berdasarkan profil KLT. Persen inhibisi elastase berturut-turut pada konsentrasi 50; 25; dan 12,5 µg/mL, fraksi A adalah 68,3; 57,0; dan 47,6% dan fraksi B adalah 68,1; 64,0; dan 48,3%. Pada konsentrasi yang sama, nilai persen inhibisi fraksi A dan B lebih besar jika dibandingkan asam oleanolat yaitu 62,4; 55,9; dan 46,5%. Uji kinetika enzim menunjukkan fraksi B daun *M. leucadendron* L. menghambat elastase secara kompetitif. Hasil identifikasi golongan senyawa menunjukkan bahwa fraksi A dan B daun *M. leucadendron* L. mengandung flavonoid dan terpen.

Inhibition of elastase activity can be applied as a method to protect against skin aging. This research was conducted to obtain Indonesian plants that have potential as elastase inhibitors using virtual screening with the molecular docking software AutoDock. Virtual screening of 1406 compounds from a database of medicinal plants in Indonesia on the inhibition of elastase obtained the highest rank is leucadenone A-D. In vitro assay on elastase inhibitory of leaves extract and fractions *Melaleuca leucadendron* L. containing leucadenone A-D compounds which ranks the top 5 of the virtual screening results. Fresh leaves of *M. leucadendron* L. extracted by maceration with acetone and then fractionated with chloroform. Chloroform fraction was fractionated using vacuum liquid chromatography and obtained 6 fractions (A-F) were combined based on TLC profiles. Percent inhibition of elastase at concentrations of 50; 25; and 12.5 µg/mL respectively, fraction A was 68.3; 57.0; and 47.6% and fraction B was 68.1; 64.0; and 48.3%. At the same concentration, percent inhibition of fractions A and B greater than oleanolat acid was 62.4; 55.9; and 46.5%. Enzyme kinetics assays showed that B fraction leaves *Melaleuca leucadendron* L. inhibited competitively. Phytochemical screening showed that A and B fraction leaves of *M. leucadendron* L. contained flavonoids and terpenes.