

# Interaksi molekuler senyawa flavonoid dari ekstrak *strobilanthes crispus* L. dengan target protein pada *mycobacterium tuberculosis* sebagai sediaan obat anti tuberkulosis = Molecular interaction of flavonoid compounds from *strobilanthes crispus* L. extract with protein targets in *mycobacterium tuberculosis* as an anti-tuberculosis drug

Linatri Purwati Latifah Supriatna, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505661&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Epidemi tuberkulosis masih menjadi beban Indonesia saat ini dimana tercatat sebanyak 845 ribu jiwa di Indonesia mengidap penyakit tuberkulosis dengan persentase terbanyak terdapat pada kelompok usia produktif, yaitu umur 15 – 64 tahun sebanyak 89,6%. Tuberkulosis adalah penyakit menular yang diakibatkan oleh infeksi *Mycobacterium tuberculosis*. Kemunculan Multi-drug Resistant Tuberculosis (MDR-TB) mendorong adanya pemanfaatan flavonoid sebagai sediaan Obat Anti Tuberkulosis (OAT). Flavonoid memiliki kemampuan untuk mengembalikan resistensi antibiotik dan meningkatkan performa OAT saat ini. Perkembangan dalam penemuan obat saat ini dilakukan dengan melakukan studi *in silico* melalui penambatan molekuler antara beberapa senyawa golongan flavonoid dengan protein pada *Mycobacterium tuberculosis*. Penelitian ini menunjukkan bahwa kuersetin menghasilkan nilai penambatan dan konstanta inhibisi terbaik dengan nilai penambatan pada protein  $\hat{I}^2$ -ketoacyl-ACP reductase (PDB ID:1UZN), Enoyl-Acyl Carrier Protein Reductase (PDB ID:2X23), dan Protein Kinase G (PDB ID:2PZI) masing-masing sebesar -8,0 kkal/mol; -9,2 kkal/mol; dan -8,0 kkal/mol serta konstanta inhibisi masing-masing sebesar 1,345  $\mu$ M; 0,177  $\mu$ M; dan 1,345  $\mu$ M. Kuersetin dari daun keji beling (*Strobilanthes crispus* L.) selanjutnya diperoleh menggunakan metode Ultrasound Enzymatic-Assisted Aqueous Two-Phase Extraction (UEAATPE) dengan sistem etanol/amonium sulfat. Adapun rancangan sistem Aqueous Two-Phase terbaik yaitu etanol 33% (w/w) dan amonium sulfat 14% (w/w) dengan konsentrasi kuersetin yang dihasilkan sebesar 44,717 $\pm$ 0,295 mg/L. Selain kuersetin, senyawa 1,14-tetradecanediol yang teridentifikasi oleh Gas Chromatography-Mass Spectrophotometer (GC-MS) juga memiliki aktivitas anti tuberkulosis

<hr>

Tuberculosis epidemic is still a burden for Indonesia. There are 845 thousand of Indonesian people suffer from tuberculosis with the highest percentage in the productive age which 15 - 64 years by 89.6%. Tuberculosis is an infectious disease that caused by *Mycobacterium tuberculosis* infection. The emergence of Multi-Drug Resistant Tuberculosis (MDR-TB) encourages the utilization of flavonoids as anti-tuberculosis drugs. Flavonoids have the ability to recover antibiotic resistance and improve current anti-tuberculosis drugs performance. Development of drug discovery is currently being carried out by *in silico* study through molecular docking between flavonoid compounds to protein targets in *Mycobacterium tuberculosis*. This study shows that quercetin produces the best docking score and inhibition constant with the docking score of  $\hat{I}^2$ -ketoacyl-ACP reductase (PDB ID: 1UZN), Enoyl-Acyl Carrier Protein Reductase (PDB ID : 2X23), and Protein Kinase G (PDB ID: 2PZI) respectively are -8.0 kcal/mol; -9.2 kcal/mol; and - 8.0 kcal/mol and the inhibition constants respectively are 1,345  $\mu$ M; 0,177  $\mu$ M; and 1,345  $\mu$ M. Quercetin from

*Strobilanthes crispus* L. is obtained using Ultrasound Enzymatic – Assisted Aqueous Two-Phase Extraction (UEAATPE) method with ethanol/ammonium sulfate system. The best proportion of the system is ethanol 33 wt% and ammonium sulfate 14 wt% with concentration of quercetin is  $44.717 \pm 0,295$  mg/L. Besides quercetin, 1,14-tetradecanediol compound identified by Gas Chromatography – Mass Spectrophotometer (GC-MS) is also has an anti-tuberculosis.