

ABSTRAK

Penelitian ini dilatarbelakangi oleh seringnya pemanfaatan tanaman herbal dilingkungan masyarakat salah satunya tanaman saga yang digunakan untuk menurunkan suhu tubuh di daerah Kecamatan Tirtajaya Kabupaten Karawang. Pada daun saga mengandung beberapa metabolit sekunder yang potensial sebagai antipiretik yaitu flavonoid. Tujuan penelitian untuk Mengetahui aktivitas inhibitor senyawa flavonoid daun saga (*Abrus precatoris* L.) sebagai penghambat reseptor COX-2 dan reseptor IL-1 yang berperan sebagai penurunan demam. Metode yang digunakan ialah studi farmakokinetik dan toksisitas, *molecular docking* dan simulasi *molecular dynamic*. Hasil *molecular docking* 7 senyawa turunan flavonoid daun saga terhadap reseptor *cyclooxygenase-2* (4PH9), didapatkan senyawa isohemiphloin memiliki energi bebas Gibbs (ΔG) terendah sebesar -7.08 kkal/mol dan interleukin-1 (5R85), didapatkan senyawa cirsimaritin memiliki energi bebas Gibbs (ΔG) terendah sebesar -7.78 kkal/mol. Hasil *drug scan*, senyawa terbaik memenuhi 4 dari 5 aturan Lipinski. Hasil prediksi farmakokinetik dan toksisitas, senyawa terbaik memiliki profil farmakokinetik yang cukup baik, dan tidak toksik. Dari hasil ini didapatkan bahwa senyawa isohemiphloin daun saga diprediksi berinteraksi dengan reseptor *cyclooxygenase-2* (4PH9) berpotensi sebagai kandidat obat antipiretik.

Kata Kunci: Demam, Cyclooxygenase-2, Flavonoid daun Saga, Virtual Screening.

ABSTRACT

This research is backed by the frequent use of herbal plants in the community, one of which is the saga plant, which is used to reduce body temperature in the Tirtajaya District, Karawang Regency. Saga leaves contain several secondary metabolites that have potential antipyretics, namely flavonoids. The study aimed to determine the inhibitory activity of flavonoid compounds of saga leaves (*Abrus precatory* L.) as inhibitors of COX-2 receptors and IL-1 receptors that play a role in reducing fever. The methods used are pharmacokinetic and toxicity studies, molecular docking, and molecular dynamic simulation. The results of molecular docking of 7 flavonoid-derived compounds of saga leaves against cyclooxygenase-2 (4PH9) receptors, obtained isohemiphloin compounds have the lowest Gibbs free energy (ΔG) of -7.08 kcal/mol and interleukin-1 (5R85), obtained cirsimaritin compounds have the lowest Gibbs free energy (ΔG) of -7.78 kcal/mol. Drug scan results, the best compound fulfills 4 out of 5 Lipinski rules. Pharmacokinetic and toxicity prediction results; the best compound has a fairly good pharmacokinetic profile and is not toxic. These results showed that the saga leaf isohemiphloin compound is predicted to interact with the cyclooxygenase-2 (4PH9) receptor as a potential antipyretic drug candidate.

Keywords: Fever, Cyclooxygenase-2, Flavonoid Saga Leave, Virtual Screening