

ANALISIS IN SILICO SENYAWA EUGENOL DAN BETA-CARYOPHYLLENE DALAM TANAMAN CENGKEH (*Syzygium aromaticum* L.) TERHADAP PROTEIN NF- κ B SEBAGAI ANTI-INFLAMASI PADA ATEROSKLEROSIS

FAUZIAH QURROTA AYUNI

1177020025

ABSTRAK

Penyakit aterosklerosis merupakan salah satu penyebab utama penyakit kardiovaskuler yang terdata oleh WHO sebagai penyakit mematikan teratas sedunia. Penyakit aterosklerosis adalah penyakit inflamasi kronis pada dinding arteri akibat faktor resiko seperti hipertensi, hiperlipidemia, gaya hidup tidak sehat, atau genetik. Protein NF- κ B sebagai faktor transkripsi yang memediasi ekspresi gen-gen inflamasi memegang peranan penting dalam perkembangan aterosklerosis. Senyawa eugenol dan beta-caryophyllene pada tanaman cengkeh (*Syzygium aromaticum* L.) dilaporkan memiliki aktivitas anti-inflamasi dan anti-aterosklerosis. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui nilai *binding affinity* senyawa eugenol dan BCP saat ditambatkan pada sisi aktif protein NF- κ B, serta untuk mengetahui interaksi yang terbentuk dari hasil penambatan keduanya. Penelitian dilakukan dengan pendekatan in silico melalui teknik penambatan molekuler. Dari hasil penelitian, didapatkan nilai *binding affinity* eugenol dan BCP secara berturut-turut sebesar -5,9 kkal/mol dan -7,0 kkal/mol. Hasil penambatan menunjukkan bahwa senyawa eugenol membentuk 12 interaksi pada sisi aktif yang terdiri dari interaksi hidrogen konvensional, hidrogen karbon, pi-sigma, alkil, serta Van Der Waals. Sedangkan pada BCP, terbentuk 5 interaksi di luar sisi aktif yang terdiri dari interaksi Van Der Waals, alkil, dan pi-sigma. Berdasarkan data tersebut, dapat disimpulkan bahwa senyawa eugenol menunjukkan potensi sebagai penghambat aktivasi NF- κ B dalam aterogenesis yang lebih menjanjikan dibandingkan dengan senyawa BCP.

Kata kunci: aterosklerosis, anti-inflamasi, cengkeh (*Syzygium aromaticum* L.), penambatan molekuler, protein NF- κ B.

**IN SILICO ANALYSIS OF EUGENOL AND BETA-CARYOPHYLLENE IN
CLOVE (*Syzygium aromaticum* L.) AGAINST NF- κ B PROTEIN AS ANTI-
INFLAMMATORY IN ATHEROSCLEROSIS**

FAUZIAH QURROTA AYUNI

1177020025

ABSTRACT

Atherosclerosis is one of the main causes of cardiovascular disease, which is listed by WHO as the world's top deadly disease. Atherosclerosis is a chronic inflammatory disease of the artery walls due to some risk factors such as unhealthy lifestyle and genetics. NF- κ B protein as inflammatory mediator plays an important role in the development of atherosclerosis. Eugenol and beta-caryophyllene (BCP) in clove (*Syzygium aromaticum* L.) reported to have anti-inflammatory and anti-atherosclerosis activity through the inhibition of NF- κ B activation. The purpose of this study was to determine the binding affinity of these compounds when they are docked to the active site of NF- κ B protein, as well as to determine the interactions formed between them. The research was conducted with an in silico approach through molecular docking technique. The results of this research show that the binding affinity of eugenol and BCP are -5,9 kcal/mol and -7,0 kcal/mol, respectively. The docking results also showed that eugenol formed 12 interactions on the active site of NF- κ B protein which consist of conventional hydrogen bond, carbon hydrogen bond, pi-sigma, alkyl, and Van Der Waals interaction. Meanwhile, in BCP, 5 interactions were formed outside the active site which consist of Van Der Waals, akyl, and pi-sigma interaction. Based on these data, it can be concluded that eugenol from clove show potential as inhibitors of NF- κ B activation in atherogenesis and is more promising than BCP.

Keywords: atherosclerosis, anti-inflammatory, clove (*Syzygium aromaticum* L.), molecular docking, NF- κ B protein.