

PROFIL FITOKIMIA DAN POTENSI ANTIDEPRESAN EKSTRAK METANOLIK AKAR, BATANG, DAN DAUN TELANG (*Clitoria ternatea* L.) SECARA *IN SILICO*

Eliza Falahatul Islami

19/441271/BI/10263

Pembimbing: Prof. Dra. Rarastoeti Pratiwi, M.Sc., Ph.D.

INTISARI

Depresi merupakan gangguan pada kesehatan mental yang menyebabkan penderitanya mengalami gangguan dalam berpikir, melakukan pekerjaan sehari-hari, hingga nekat untuk bunuh diri. Pengobatan depresi dapat dilakukan dengan pemberian obat antidepresan. Namun, obat antidepresan memiliki efek samping yang merugikan untuk pasien. Oleh karena itu, perlu ditemukan obat alternatif yang memiliki efektivitas tinggi dan efek samping yang ringan. *Clitoria ternatea* L. dilaporkan memiliki aktivitas ansiolitik, antistres, antidepresan, dan sedatif serta telah dimanfaatkan sebagai obat otak oleh masyarakat India. Tujuan dilakukannya penelitian ini adalah untuk mengetahui profil metabolit sekunder ekstrak metanolik akar, batang, dan daun *C. ternatea* berdasarkan analisis hasil GC-MS dan potensinya dalam menghambat protein target penyebab depresi berdasarkan hasil *molecular docking*. Bahan-bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah akar, batang, dan daun *C. ternatea*, metanol, air, dan kertas saring. Penelitian ini dilakukan dengan tahapan preparasi bahan, ekstraksi metanol, uji GC-MS, identifikasi fitokomponen, prediksi bioaktivitas senyawa aktif, preparasi protein target dan senyawa aktif, validasi protokol *docking*, *molecular docking*, dan visualisasi hasil *molecular docking*. Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, didapatkan hasil uji GC-MS yaitu terkandung senyawa 3-O-Methyl-d-glucose pada akar dengan *relavite area* sebesar 23,29%; senyawa Campesterol, Stigmasetrol, dan Clionasterol pada batang dengan total *relative area* sebesar 16,73%; dan senyawa ester pada daun dengan total *relative area* sebesar 46,38%. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa senyawa Octose, Desulphosinigrin, dan Stigmasterol memiliki nilai *Ki* lebih rendah dari *native ligand*, dengan masing-masing sebesar 93,71 nM, 95,25 nM, dan 16,88 nM. Sementara itu, 1,1'-Ethyne-1,2-diylbis(2,4-dimethoxybenzene), Methyl (E)-octadec-10-enoate, Tri-dpd, Palmitelaidic acid, dan 4-Hexadecen-6-yne, (Z)- memiliki nilai *Ki* lebih rendah dari kontrol positif, dengan masing-masing sebesar 265.55 nM, 245.5 nM, 415.21 nM, 439 nM, 405.46 nM, dan 415.21 nM. Senyawa-senyawa tersebut memiliki potensi dalam menghambat aktivitas target penyebab depresi secara lebih efektif. Kesimpulan dari penelitian ini adalah ekstrak metanolik akar, batang, dan daun telang memiliki potensi sebagai antidepresan.

Kata kunci: Antidepresan, *Clitoria ternatea*, Depresi, *Molecular Docking*, Telang

*PHYTOCHEMICAL PROFILE AND ANTIDEPRESSANT POTENTIAL OF
METHANOLIC EXTRACT OF BUTTERFLY PEA (*Clitoria ternatea* L.)
ROOTS, STEMS, AND LEAVES THROUGH AN *IN SILICO* APPROACH*

Eliza Falahatul Islami
19/441271/BI/10263

Supervisor: Prof. Dra. Rarastoeti Pratiwi, M.Sc., Ph.D.

ABSTRACT

Depression is a mental health disorder that causes sufferers to experience problems in thinking, doing daily chores, and even suicidal thoughts. Treatment of depression can be done by administering antidepressant drugs. However, antidepressant drugs have adverse side effects for patients. Therefore, it is necessary to find alternative drugs that have high effectiveness and mild side effects. Clitoria ternatea L. is reported to have anxiolytic, antistress, antidepressant, and sedative activities and has been utilized as a brain medicine by the people of India. The purpose of this study was to determine the secondary metabolite profile of methanolic extracts of C. ternatea roots, stems, and leaves based on GC-MS analysis and its potential in inhibiting target proteins that cause depression based on molecular docking results. The materials used in this study were C. ternatea roots, stems, and leaves, methanol, water, and filter paper. This research was conducted with the stages of material preparation, methanol extraction, GC-MS test, phytochemical identification, prediction of bioactivity of active compounds, preparation of target proteins and active compounds, validation of docking protocols, molecular docking, and visualization of molecular docking results. Based on the research that has been done, the GC-MS test results show that there are 3-O-Methyl-d-glucose compounds in the roots with a relative area of 23.29%; Campesterol, Stigmasterol, and Clionasterol compounds in the stems with a total relative area of 16.73%; and ester compounds in the leaves with a total relative area of 46.38%. The molecular docking results showed that Octose, Desulphosinigrin, and Stigmasterol compounds had lower Ki values than the native ligand, with 93.71 nM, 95.25 nM, and 16.88 nM, respectively. Meanwhile, 1,1'-Ethyne-1,2-diylbis(2,4-dimethoxybenzene), Methyl (E)-octadec-10-enoate, Tri-dpd, Palmitelaidic acid, and 4-Hexadecen-6-yne, (Z)- had lower Ki values than the positive control, with 265.55 nM, 245.5 nM, 415.21 nM, 439 nM, 405.46 nM, and 415.21 nM, respectively. These compounds have the potential to inhibit the target activity that causes depression more effectively. The conclusion of this study is that methanolic extracts of butterfly pea roots, stems, and leaves have potential as antidepressants.

Key words: Antidepressant, Butterfly Pea, Clitoria ternatea, Depression, Molecular Docking