

## POTENSI ANTIINFLAMASI EKSTRAK ETANOL RANTING GAHARU *Gyrinops versteegii* (Gilg.) Domke MELALUI ANALISIS *IN SILICO*

Shabrina Fildzah Zahidah

18/423371/BI/10005

Dosen Pembimbing: Dr. Tri Rini Nuringtyas, S.Si., M.Sc.

### INTISARI

Inflamasi, terutama inflamasi kronik, dapat menyebabkan penyakit inflamasi, dan pengobatannya dengan NSAID dalam jangka panjang dapat menyebabkan beberapa efek samping. Oleh karena itu diperlukan agen antiinflamasi yang natural dan memiliki efek samping minimal. Tanaman gaharu *Gyrinops versteegii* merupakan tanaman endemik Lombok yang diketahui memiliki banyak potensi dalam bidang biokimia maupun farmasi. Ekstrak dari *G. versteegii* diketahui memiliki berbagai bioaktivitas, seperti antioksidan, antikanker, dan antidiabetes, yang dikarenakan adanya kandungan flavonoid dan terpenoid di dalamnya. Adanya aktivitas antioksidan secara tidak langsung berkaitan dengan kemungkinan adanya potensi antiinflamasi. Dalam budidaya gaharu, dilakukan inokulasi dengan fungi, umumnya *Fusarium* sp. untuk membentuk gubal gaharu. Inokulasi tersebut menyebabkan kenaikan kuantitas seskuiterpen dan feniletikromon pada bagian yang diinokulasi. Sejauh ini penelitian terkait *G. versteegii* lebih banyak berfokus ke daun. Informasi dan penelitian terkait kandungan senyawa pada ranting *G. versteegii* dan potensinya masih sangat terbatas. Oleh karena itu penelitian ini dilakukan untuk mengevaluasi potensi antiinflamasi pada ekstrak ranting *G. versteegii* dengan sampel dari pohon yang belum diinokulasi dan sudah diinokulasi secara *in silico*. Metode pada penelitian ini secara garis besar meliputi ekstraksi sampel, uji metabolomic dengan LC-HRMS, dan molecular docking. Berdasarkan hasil penelitian ini, kandungan senyawa pada ekstrak etanol ranting *Gyrinops versteegii* yang belum diinokulasi maupun sudah diinokulasi relatif mirip, terdiri dari flavonoid, asam lemak, asam karboksilat, asam amino, senyawa aromatik, senyawa heterosiklik, lipid, steroid, dan poliketida. Senyawa dengan potensi antiinflamasi paling baik pada ekstrak etanol ranting *G. versteegii* belum diinokulasi adalah Leptosidin 6-glucosyl-(1->4)-rhamnoside dengan *binding affinity* -11.4 kcal/mol, sedangkan pada ekstrak etanol ranting *G. versteegii* belum diinokulasi adalah Scutellarein 7,4'-dimethyl ether 6-sophoroside dengan *binding affinity* -10.6 kcal/mol.

Kata kunci: gaharu, *Gyrinops versteegii*, antiinflamasi, *Fusarium* sp., LC-HRMS, *molecular docking*,

## ANTIINFLAMMATORY ACTIVITY OF AGARWOOD *Gyrinops versteegii* (Gg.) Domke TWIG ETHANOL EXTRACT THROUGH *IN SILICO* ANALYSIS

Shabrina Fildzah Zahidah

18/423371/BI/10005

Supervisor: Dr. Tri Rini Nuringtyas, S.Si., M.Sc.

### ABSTRACT

Inflammation, particularly chronic inflammation, can lead to inflammatory diseases. Long-term treatment with NSAIDs, however, can cause several side effects. Therefore, there is a need for natural anti-inflammatory agents with minimal side effects. Agarwood *Gyrinops versteegii*, an endemic plant to Lombok, Indonesia, holds significant biochemical and pharmaceutical potential. Extracts from *G. versteegii* are known for various bioactivities, including antioxidant, anticancer, and antidiabetic properties, attributed to their flavonoid and terpenoid content. Its antioxidant activity indirectly suggests potential anti-inflammatory effects. In agarwood cultivation, inoculation with fungi, typically *Fusarium sp.*, is performed to induce agarwood formation. This inoculation increases the quantity of sesquiterpenes and phenylethylchromones in the inoculated parts. While previous research on *G. versteegii* has primarily focused on its leaves, information regarding the compounds and potential of its twigs remains limited. This study aimed to evaluate the anti-inflammatory potential of *G. versteegii* twig extracts, using samples from both uninoculated and inoculated trees. The methodology involved sample extraction, metabolomic profiling using LC-HRMS, and molecular docking simulations. Our findings indicate that the compound profiles in the ethanol extracts of uninoculated and inoculated *G. versteegii* twigs are relatively similar, comprising flavonoids, fatty acids, carboxylic acids, amino acids, aromatic compounds, heterocyclic compounds, lipids, steroids, and polyketides. The compound with the most promising anti-inflammatory potential in the uninoculated twig extract was Leptosidin 6-glucosyl-(1->4)-rhamnoside, exhibiting a binding affinity of -11.4 kcal/mol. For the inoculated twig extract, Scutellarein 7,4'-dimethyl ether 6-sophoroside showed the best anti-inflammatory potential with a binding affinity of -10.6 kcal/mol.

Keywords: Agarwood, *Gyrinops versteegii*, anti-inflammatory, *Fusarium sp.* LC-HRMS, molecular docking,