UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Analisis Profil Metabolit, Aktivitas Sun Protection, dan Potensi Anti-Aging Ekstrak Daun Selaginella ornata (Hook. & Grev.) (1843) secara In Vitro dan In Silico
Maritza Ayuningtyas, Dr. Tri Rini Nuringtyas, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ANALISIS PROFIL METABOLIT, AKTIVITAS *SUN PROTECTION*, DAN POTENSI ANTI-*AGING* EKSTRAK DAUN *Selaginella ornata* (Hook. & Grev.) (1843) SECARA *IN VITRO* DAN *IN SILICO*

Maritza Ayuningtyas
NIM. 21/481697/BI/10853

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

INTISARI

Paparan sinar ultraviolet (UV) secara kronis dapat menyebabkan *photoaging* melalui peningkatan ekspresi enzim matriks metalloproteinase-1 (MMP-1) yang akan mendegradasi kolagen. *Selaginella ornata* yang dikenal invasif berpotensi sebagai sumber bahan alam fotoproteksi dan *anti-aging* pada bagian daunnya, namun penelitian terkait profil metabolit dan aktivitasnya masih terbatas. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui profil fitokimia ekstrak daun *S. ornata*, mengevaluasi kemampuan fotoproteksi secara in vitro melalui nilai SPF, dan mengidentifikasi metabolit yang berpotensi sebagai agen *anti-aging* secara *in silico*. Profil metabolit dianalisis menggunakan spektrofotometri UV-Vis yang dilanjutkan dengan analisis PCA dan identifikasi senyawa melalui LC-HRMS. Nilai SPF ditentukan dengan rumus Petro pada rentang 280-320 nm. Penambatan molekuler terhadap MMP-1 (PDB ID:966C) dilakukan pada senyawa teridentifikasi yang telah diseleksi berdasarkan aturan Lipinski dan level toksisitas. Hasil penelitian menunjukkan hasil PCA mengindikasikan variasi dalam profil metabolit dalam ekstrak daun yang dikoleksi pada berbagai lokasi yang berbeda ketinggiannya. LC-HRMS mengidentifikasi metabolit sekunder yang berasal dari golongan biflavonoid, terpenoid, dan alkaloid. Ekstrak daun *S. ornata* menunjukkan kemampuan fotoproteksi sedang dengan nilai SPF tertinggi diperoleh Tuk Pakis (17,928±0,398) dan Sobleman 1 (17,977±0,245). Hasil penambatan molekuler menunjukkan apigenin memiliki afinitas terbaik (ΔG = –8,7 kkal/mol, Ki = 0,42 µM), diikuti ginkgetin dan bilobetin (ΔG = –8,4 kkal/mol, Ki = 0,70 µM) yang berinteraksi dengan residu sisi aktif MMP-1 (His218, Ala182, Tyr240, Val215). Hasil ini mendukung potensi ekstrak dan *S. ornata* sebagai agen *anti-aging* alami melalui inhibisi MMP-1.

Kata Kunci: *Anti-aging*, LC-HRMS, MMP-1, *Photoaging*, *Selaginella ornata*.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Analisis Profil Metabolit, Aktivitas Sun Protection, dan Potensi Anti-Aging Ekstrak Daun Selaginella ornata (Hook. & Grev.) (1843) secara In Vitro dan In Silico
Maritza Ayuningtyas, Dr. Tri Rini Nuringtyas, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

IN VITRO AND IN SILICO ANALYSIS OF METABOLITE PROFILE, SUN PROTECTION ACTIVITY, AND ANTI-AGING POTENTIAL OF *Selaginella ornata* (Hook. & Grev.) (1843) LEAF EXTRACT

Maritza Ayuningtyas
NIM. 21/481697/BI/10853

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

ABSTRACT

Chronic exposure to ultraviolet (UV) radiation causes photoaging by increasing the expression of matrix metalloproteinase-1 (MMP-1), an enzyme that degrades collagen. The invasive plant *Selaginella ornata* has potential as a natural source of photoprotective and anti-aging agents, particularly from its leaves; however, studies on its metabolite profile and biological activities remain limited. This study aimed to analyze the phytochemical profile of *S. ornata* leaf extract, evaluate its in vitro photoprotection ability through SPF measurement, and identify metabolites with potential anti-aging activity using in silico approaches. The metabolite profile was analyzed using UV-Vis spectrophotometry followed by PCA, and compound identification was performed using LC-HRMS. SPF values were determined using the Petro formula in the wavelength range of 280–320 nm. Molecular docking was conducted against MMP-1 (PDB ID:966C) for the identified compounds that had been pre-selected based on Lipinski's rule of five and toxicity levels. The PCA results indicated variations in the metabolite profiles of leaf extracts collected from different elevations. LC-HRMS identified secondary metabolites belonging to flavonoid, terpenoids, and alkaloids. The leaf extract of *S. ornata* showed moderate photoprotection ability, with the highest SPF values obtained from Tuk Pakis (17.928 ± 0.398) and Sobleman 1 (17.977 ± 0.245). Molecular docking results revealed that apigenin had the best binding affinity (ΔG = –8.7 kcal/mol, Ki = 0.42 µM), followed by ginkgetin and bilobetin (ΔG = –8.4 kcal/mol, Ki = 0.70 µM). These compounds interacted with key active-site residues of MMP-1 (His218, Ala182, Tyr240, Val215). This result supporting the potential of *S. ornata* leaf extract as a natural anti-aging agent through MMP-1 inhibition.

Keywords: Anti-aging, LC-HRMS, MMP-1, Photoaging, *Selaginella ornata*