

Penambatan Molekuler Interaksi Senyawa pada Tanaman *Plectranthus amboinicus* terhadap Protein Target p53 sebagai Kandidat Obat Anti-Aging = Molecular Docking of Compounds from *Plectranthus amboinicus* against Target Protein p53 as a Candidate for Anti-Aging Medicine

Naila Ramadhanty Arifaputri, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920537075&lokasi=lokal>

Abstrak

Pendahuluan: Data Susenas tahun 2022 yang dikeluarkan oleh Badan Pusat Statistik (BPS) mencatat bahwa 10,48% penduduk Indonesia adalah lansia dengan 2 dari 5 lansia memiliki keluhan kesehatan. Hal ini bisa disebabkan karena banyaknya faktor ekstrinsik maupun intrinsik yang menyebabkan kerusakan seluler sehingga menginduksi protein p53 untuk melakukan cellular senescence. Senyawa thymol, carvacrol, dan flavonoid (quercetin, luteolin, apigenin, rutin, eriodictyol) dalam ekstrak tanaman *Plectranthus amboinicus* yang kaya akan antioksidan dipercaya dapat menghambat proses cellular senescence sehingga dapat menekan proses penuaan. Dengan itu, tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui interaksi antara komponen ligan pada senyawa aktif thymol, carvacrol, dan flavonoid yang terkandung dalam *Plectranthus amboinicus* dengan protein target p53 yang berkaitan dengan aktivitas cellular senescence pada proses penuaan. **Metode:** Studi *in silico* melalui molecular docking (penambatan molekuler) untuk menguji interaksi molekuler dari ligan senyawa thymol, carvacrol, dan flavonoid (quercetin, luteolin, apigenin, rutin, eriodictyol) dari tanaman *Plectranthus amboinicus* terhadap reseptor protein target p53 yang bertanggung jawab dalam proses cellular senescence. Hasil interaksi yang didapat merupakan sebuah histogram yang akan dianalisis dan diinterpretasikan untuk mengetahui afinitas ikatan (binding affinity) dari interaksi yang terjadi. **Hasil:** Terjadi interaksi antara ligan senyawa thymol, carvacrol, dan flavonoid (quercetin, luteolin, apigenin, rutin, eriodictyol) dari tanaman *Plectranthus amboinicus* terhadap reseptor protein target p53. **Kesimpulan:** *Plectranthus amboinicus* berpotensi menjadi agen anti-aging yang dapat menghambat dan memperlambat proses dari penuaan melalui studi *in silico*. Akan tetapi, perlu dilakukan penelitian lebih lanjut mengenai mengenai sifat-sifat dari *Plectranthus amboinicus* untuk mengetahui potensi tanaman ini terhadap tubuh manusia yang belum diketahui.

.....Introduction: The 2022 Susenas data stated by the Central Statistics Agency (BPS) notes that 10.48% of Indonesia's population are elderly with 2 out of 5 having health complaints. This could be due to the many extrinsic and intrinsic factors that causes cellular damage thereby inducing the p53 protein to perform cellular senescence. Compounds of thymol, carvacrol, and flavonoids (quercetin, luteolin, apigenin, rutin, eriodictyol) from the extract of the *Plectranthus amboinicus* plant which are rich in antioxidants are believed to have the potential to inhibit the cellular senescence process so as to suppress the aging process. The purpose of this research is to investigate the interaction between the ligand of thymol, carvacrol, and flavonoid compounds from *Plectranthus amboinicus* with the p53 target protein which is associated with cellular senescence activity in the aging process. **Methods:** *In silico* study through molecular docking to examine the molecular interactions of the ligands of thymol, carvacrol, and flavonoids (quercetin, luteolin, apigenin, rutin, eriodictyol) from the *Plectranthus amboinicus* plant against the target protein receptor p53 which is responsible for the process of cellular senescence. The interaction results obtained is a histogram

which will be analyzed and interpreted to determine the binding affinity of the interactions that occurred.

Results: Interactions existed between the ligands of thymol, carvacrol, and flavonoids (quercetin, luteolin, apigenin, rutin, eriodictyol) from the *Plectranthus amboinicus* plant against the target protein receptor p53.

Conclusion: *Plectranthus amboinicus* has the potential to be an anti-aging agent that can inhibit and slow down the process of aging through in silico studies. However, it is necessary to carry out further research regarding the properties of *Plectranthus amboinicus* to determine the unknown potential of this plant to the human body.