

ABSTRAK

POTENSI QUERCETIN SEBAGAI TERAPI PENYAKIT PARKINSON DILIHAT DARI *BINDING AFFINITY* TERHADAP ADENOSINE A2A RECEPTOR SECARA *IN-SILICO*

Oleh: Adjie Wahyu Pradana

Penyakit parkinson merupakan penyakit degeneratif yang menyebabkan gangguan mobilitas dan kendali otot yang disebabkan oleh penurunan produksi dopamin dalam otak. Terapi untuk penyakit parkinson adalah terapi dopaminergik dengan menggunakan levodopa yang bekerja dengan menggantikan dopamin yang berkurang, penggunaan levodopa memiliki efek samping seperti pusing, mual, dan rasa kantuk berlebih. Penggunaan istradefylline bersama levodopa sebagai terapi non-dopaminergik pada parkinson mengurangi efek samping dan meningkatkan target terapi. Quercetin diduga memiliki aktivitas dalam meningkatkan fungsi motorik pada parkinson. Tujuan penelitian ini adalah melihat potensi quercetin sebagai terapi parkinson.

Desain penelitian ini adalah *in-silico*, yaitu penelitian menggunakan bantuan kalkulasi komputer, metode yang digunakan adalah *molecular docking* yang berdasarkan prinsip ikatan senyawa terhadap reseptor. Senyawa ligan didapatkan dari PubChem dan gugus reseptor didapatkan dari *Protein Data Bank*. *Software docking* yang digunakan adalah Pyrex, dan *Discovery Studio Analyzer*. Variabel bebas pada penelitian ini adalah quercetin dan istradefylline, sedangkan variabel terikatnya adalah *binding affinity* ligan terhadap adenosine A2a receptor. Pada penelitian ini dilakukan analisis statistik menggunakan *independent sample t-test*.

Uji *in-silico* dengan metode *molecular docking* menunjukkan masing-masing 9 posisi ligan terhadap reseptor, hasil analisis data dengan uji *independent sample t-test*, pada derajat kemaknaan $\alpha = 0.05$ didapatkan hasil statistik dengan nilai signifikansi 0.013 yang berarti ligan quercetin memiliki potensi yang beda signifikan dibandingkan istradefylline karena quercetin memiliki nilai *binding affinity* lebih negatif daripada istradefylline. Quercetin memiliki nilai *binding affinity* sebesar -8.1 kkal/mol, sedangkan istradefylline memiliki nilai *binding affinity* sebesar -6.9 kkal/mol. Quercetin terbukti memiliki potensi sebagai alternatif terapi penyakit parkinson.

Kata kunci : quercetin, parkinson, istradefylline, adenosine A2a receptor, *molecular docking*

ABSTRACT

POTENTIAL OF QUERCETIN AS PARKINSON'S DISEASE THERAPY ASSESSED FROM BINDING AFFINITY TO ADENOSINE A2A RECEPTOR USING IN-SILICO

Writer: Adjie Wahyu Pradana

Parkinson's disease is a degenerative disease that causes impaired mobility and muscle control caused by decreased dopamine production in the brain. Therapy for parkinson's disease is dopaminergic therapy using levodopa which works by replacing the reduced dopamine, the use of levodopa has side effects such as dizziness, nausea, and excessive drowsiness. The use of istradefylline with levodopa as a non-dopaminergic therapy in parkinson's reduces side effects and increases therapeutic targets. *Quercetin* is thought to have activity in improving motor function in parkinson's. The aim of this study was to look at the potential of *quercetin* as a parkinson's therapy.

The design of this study is in-silico, which is a study using the help of computer calculations, the method used is molecular docking which is based on the principle of bonding compounds to receptors. Ligand compounds obtained from PubChem and receptor clusters obtained from Protein Data Bank. The docking Software used is Pyrex, and Discovery Studio Analyzer. The independent variables in this study were *quercetin* and istradefylline, while the dependent variable was binding affinity ligand to *adenosine A2a receptor*. In this study, statistical analysis was conducted using an independent sample t-test.

In-silico test with molecular docking method showed each of the 9 ligand position to the receptor, the results of data analysis with independent sample t-test, at the degree of significance $\alpha = 0.05$ obtained statistical results with a significance value of 0.013 which means that the *quercetin* ligand is significantly different than istradefylline because *quercetin* has lower negative value of binding affinity compared to istradefylline. *Quercetin* has a binding affinity value of -8.1 kcal/mol, while istradefylline has a binding affinity value of -6.9 kcal / mol. *Quercetin* has been shown to have potential as an alternative therapy for parkinson's disease.

Keywords : *quercetin*, parkinson, istradefylline, *adenosine A2a receptor*, molecular docking