

# JKTI

## JURNAL KIMIA TERAPAN INDONESIA

Isolasi dan Pemurnian Wedelolakton dari Tumbuhan Urang Aring (*Eclipta alba* L.hassk)/*Isolation and Purification of Wedelolactone from Eclipta alba L.Hassk Plant*

Karakteristisasi dan Uji Homogenitas Kandidat Bahan Acuan Bufer ftalat dan Bufer fosfat untuk Pengukuran Derajat Keasaman /*Characterize and Homogeneity Test of phthalate and phosphate buffer as Reference Materials Candidate for Determination of Acidic Value*

Pengembangan dan Validasi Metode Kromatografi Lapis Tipis Densitometri untuk Penetapan Kadar Teofilin dan Efedrin Hidroklorida secara Simultan pada Sediaan Tablet /*Development and Method Validation Densitometry Thin Layer Chromatography for the Simultaneous Determination of Theophylline and Ephedrine Hydrochloride in Tablet Dosage form*

Sitotoksitas Xanthorrhizol dari Minyak Atsiri Rimpang *Curcuma Xanthorrhiza* Roxb. terhadap Sel Kanker Payudara YBM-1 /*Cytotoxic Activity of Xanthorrhizol from Curcuma Xanthorrhiza Roxb.'s Volatile Oil Toward YBM-1 Breast Cancer Cell*

Docking Molekul dengan Metoda Molegro Virtual Docker dari Ekstrak Air *Psidium Guajava, linn* dan *Citrus Sinensis, Peels* sebagai Inhibitor pada *Tyrosinase* untuk Pemutih Kulit /*Molecular Docking Using Molegro Virtual Docker (MVD) on Water Extract of Guava fruit (Psidium guajava, linn) and Sweet Orange (citrus sinensis, peels) as Inhibitor on Enzyme Tyrosinase as Positive Control of Whitening Agent*

Aplikasi Kalsium Klorida dan Ethepon dalam Upaya Peningkatan Kualitas Buah Nanas (*Ananas comosus* (L) Merr) /*Application and Ethepon of Calcium Chloride for Improving the Fruit Quality of Pineapple*

Uji Kinerja Katalis  $\text{Cu-ZnO/Al}_2\text{O}_3$  yang Dipreparasi dengan Metode Kopresipitasi untuk Konversi Gliserol menjadi Propanadiol /*Performance Test of Coprecipitated Catalyst Cu-ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> for the Conversion of Glycerol to Propanediol*

Sintesis dan Karakterisasi Nanokomposit Konduktif Nanofiber /*Synthesis and Characterization of Conductive Composite Nanofiber.*



LIPI

**PUSAT PENELITIAN KIMIA**  
**LEMBAGA ILMU PENGETAHUAN INDONESIA**

Jurnal Kimia Terapan Indonesia	Vol. 15	No. 1	Hal. 1 - 59	Bandung Juni 2013	ISSN 0853 - 2788
-----------------------------------	---------	-------	-------------	----------------------	---------------------

## **DOCKING MOLEKUL DENGAN METODA MOLEGRO VIRTUAL DOCKER DARI EKSTRAK AIR *Psidium guajava*, Linn DAN *Citrus sinensis*, Peels SEBAGAI INHIBITOR PADA TIROSINASE UNTUK PEMUTIH KULIT**

### **MOLECULAR DOCKING USING MOLEGRO VIRTUAL DOCKER (MVD) ON WATER EXTRACT OF GUAVA FRUIT (*PSIDIUM GUAJAVA*, LINN) AND SWEET ORANGE (*CITRUS SINENSIS*, PEELS) AS INHIBITOR ON ENZYME TYROSINASE AS POSITIVE CONTROL OF WHITENING AGENT**

**Ayik Rosita Puspaningtyas**

Fakultas Farmasi, Universitas Jember, Jember  
Jl. Kalimantan I No.2, Kampus Tegal Boto Jember 68121  
Email : aixrose\_pee@yahoo.co.id

Diterima : 8 Maret 2013, Direvisi : 19 Maret 2013, Disetujui : 25 Maret 2013

#### **ABSTRAK**

Kami telah melakukan *docking* molekul dengan menggunakan *Molegro Virtual Docker* pada ekstrak air buah jambu biji (*Psidium guajava*, Linn) dan jeruk manis (*Citrus sinensis*, Peels) sebagai inhibitor pada enzim tirosinase dengan control positif vitamin C dalam upaya mencari *whitening agent*. Berdasarkan hasil penelitian sebelumnya didapatkan senyawa kandungan utama ekstrak air buah jambu biji (*Psidium guajava*, Linn) adalah 2,6-dihidroksi-3,5-dimetil-4-O-β-D-glukopiranosil benzofenon, 3-hidroksi-2-butanon, dan vitamin C sedangkan ekstrak air buah jeruk manis (*Citrus sinensis*) adalah limonen, linalol, dan vitamin C. Pada penelitian ini didapatkan hasil *docking* senyawa pada kandungan utama ekstrak air buah *Psidium guajava* memiliki ikatan yang lebih baik sebagai inhibitor enzim tirosinase daripada *Citrus sinensis* dan vitamin C, yang dapat dilihat dari *Moldock score* yaitu -107,806 sedangkan pada *Citrus sinensis* -76,9593, yang artinya senyawa pada ekstrak air *Psidium guajava* memiliki energi yang lebih rendah sehingga lebih stabil dalam pengikatannya terhadap reseptor daripada senyawa ekstrak air *Citrus sinensis*. Hasil serupa ditunjukkan dari uji *in vitro* pada ekstrak air buah jambu biji (*Psidium guajava*) dengan  $IC_{50}$  0,26 mM sedangkan ekstrak air jeruk manis (*Citrus sinensis*)  $IC_{50}$  31,07 mM. Hal ini juga didukung oleh data ikatan hydrogen kandungan utama ekstrak air buah jambu biji (*Psidium guajava*) 2,6-dihidroksi-3,5-dimetil-4-O-β-D-glukopiranosil benzofenon dengan 5 asam amino tirosinase antara lain Gly 200, Pro 201, Gly 196, Phe 197, dan Asn 205 sedangkan pada limonen, linalool mengikat 3 asam amino yaitu Gly 200, Phe 197, dan Asn 205. Dengan demikian dapat disimpulkan bahwa interaksi ekstrak air buah jambu biji (*Psidium guajava*) terhadap enzim tirosinase lebih harmonis dan stabil daripada vitamin C maupun senyawa pada ekstrak air jeruk manis (*Citrus sinensis*).

**Kata kunci** : *Psidium guajava*, *Citrus sinensis*, tirosinase, vitamin C dan *docking Molekul*.

#### **ABSTRACT**

We have been molecular docking using *Molegro Virtual Docker (MVD)* on water extract of guava fruit (*Psidium guajava*, Linn) and sweet orange (*Citrus sinensis*, Peels) as inhibitor on enzyme tyrosinase with ascorbic acid (vitamin C) as positive control to study *whitening agent*. Based on the previous studies, the main content of the water extract of guava fruit (*Psidium guajava*) are 2,6-dihydroxy-3,5-dimethyl-4-O-β-D-glucopyranosil benzophenone, 3-hydroxy-2-butanone, and vitamin C, while the extract juice of sweet oranges (*Citrus sinensis*) are limonene, linalol, and vitamin C. In this study the results showed that the main content of the water extract of *Psidium guajava* fruit have better bond as inhibitor on tyrosinase than *Citrus sinensis* and vitamin C which can be seen from *Moldock score* of *Psidium guajava* (-107.806) and *Citrus sinensis* (-76.9593); it means slower the energy and more stable binding. The  $IC_{50}$  on water extract of guava fruit (*Psidium guajava*) and sweet orange (*Citrus sinensis*) were 0.26 mM and 31.07 mM, respectively. The hydrogen bonds of 2,6-dihydroxy-3,5-dimethyl-4-O-β-D-glucopyranosil benzophenone with 5 amino acid of tyrosinase were Gly 200, Pro 201, Gly 196, Phe 197, and Asn 205, while limonen, linalool binding 3 amino acids were Gly 200, Phe 197, and Asn 205. Finally, 3D MVD visualization between main content of guava and sweet orange water extract can be concluded that interaction of guava fruit (*Psidium guajava*) water extract against tyrosinase was more harmonious and stable than vitamin C and main content of sweet orange (*Citrus sinensis*) water extract.

**Keywords**: *Psidium guajava*, *Citrus sinensis*, tyrosinase, vitamin C and *docking molecule*

#### **PENDAHULUAN**

Indonesia merupakan negara tropis yang kaya akan sinar matahari sepanjang tahun. Sinar matahari