

ABSTRAK

Terong yang dikenal dengan nama ilmiah *Solanum melongena* L. merupakan komoditas tanaman sayuran populer yang disukai oleh banyak orang dikarenakan rasa enak dan mengandung gizi yang cukup tinggi, sehingga sangat berpotensi untuk dibudidayakan. Hal tersebut perlu diadakan penelitian lanjutan untuk pembuktian khasiat kandungannya dengan melakukan pengujian fitofarmaka dan pengujian ADMET (Absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksistas) senyawa-senyawa yang terkandung dalam kulit terong dengan metode Lc-ms/ms, dengan melakukan perbandingan pKCSM, SwissAdme, dan Protox-II dengan aplikasi software ChemDraw. Hasil skrining fitokimia ekstrak etanol kulit terong (EEKT) dijumpai adanya senyawa flavonoid, alkaloid, saponin, tannin, glikosida, namun steroid/triterpenoid tidak dijumpai. Pada pemeriksaan LC-MS/MS pada EEKT dijumpai adanya senyawa flavonoid; luteolin 5-O-glucosida, rutin, gardenin B, rosmarinic acid, ursolic acid, cosmoisin, eugenol, apigenin, ocimarin, xanthomicrol, salvigenin, namun tidak dijumpai adanya senyawa kaempferol 3-O-maonylglucoside. Hasil prediksi ADMET senyawa dengan pk-CSM, SwissAdme, dan Protox-II, dijumpai hasil yang relative sama, antara lain pada absorpsi, penilaian berat molekul senyawa secara signifikan adalah sama, berdasarkan hasil analisis menyimpulkan bahwa rata-rata berat molekul senyawa flavonoid pada EEKT adalah dibawah 500 g/mol, maka senyawa dikategorikan mudah terabsorpsi, hal tersebut dapat didukung dengan uji water solubility, caco2 permeability, intestinal absorption human. P-glikoprotein merupakan penghalang biologis yang dapat mengeluarkan racun dan xenobiotic keluar dari sel, pada senyawa-senyawa flavonoid pada EEKT tidak berfungsi sebagai penghalang biologis, bahkan berfungsi sebagai inhibitor terciptanya racun di dalam tubuh. Pada penilaian distribusi, senyawa-senyawa flavonoid EEKT cenderung berdistribusi normal, hal ini dapat disimpulkan dari penilaian VDss, fraction unbound, BBB permeability, dan CNS permeability. Senyawa yang menjadi substrat menunjukkan bahwa senyawa tersebut dapat dimetabolisme oleh CYP 450 yang merupakan enzim detoksifikasi penting dalam tubuh, sedangkan senyawa yang dapat menjadi inhibitor dapat menekan aktivitas metabolismenya. Semua senyawa flavonoid EEKT tidak dipengaruhi metabolisme dengan keberadaan oleh CYP2D6 dan tidak dapat bekerja sebagai inhibitor untuk CYP2D6. Penilaian ekskresi, yaitu dengan pengukuran kadar total clearance dan renal OCT2 substrat, senyawa-senyawa flavonoid EEKT cenderung tidak memberatkan kerja ginjal ataupun toksis pada ginjal. Pada penilaian toksisitas, melalui pengujian Ames toxicity, Max tolerated dose human, hERG I/II, LD50, senyawa-senyawa flavonoid pada EEKT cenderung tidak toksis.

ABSTRACT

Eggplant, which is known by the scientific name Solanum melongena L. is a popular vegetable commodity that is liked by many people because of its delicious taste and high nutritional content, so it has the potential to be cultivated. It is necessary to carry out further research to prove the efficacy of its content by conducting phytopharmaceutical testing and ADMET testing (Absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity) of the compounds contained in eggplant skin using the Lc-ms/ms method, by comparing pKCSM, SwissAdme, and Protox-II with the ChemDraw software application. The results of phytochemical screening of eggplant peel ethanol extract (EEKT) found the presence of flavonoid compounds, alkaloids, saponins, tannins, and glycosides, but steroids/triterpenoids were not found. The LC-MS/MS examination on EEKT found the presence of flavonoid compounds; luteolin 5-O-glucoside, rutin, gardenin B, rosmarinic acid, ursolic acid, cosmosiin, eugenol, apigenin, ocimarin, xanthomicrol, salvigenin, but no compound kaemperol 3-O-maonylglucoside was found. The prediction results of ADMET for pulsed pk-CSM, SwissAdme, and Protox-II compounds, found relatively the same results, among others in absorption, the assessment of the molecular weight of the compounds was significantly the same, based on the results of the analysis concluded that the average molecular weight of flavonoid compounds in EEKT is below 500 g/mol, then the compound is categorized as easily absorbed, this can be supported by tests of water solubility, caco2 permeability, intestinal absorption human. P-glycoprotein is a biological barrier that can remove toxins and xenobiotics from cells, the flavonoid compounds in EEKT do not function as a biological barrier and even function as an inhibitor of the creation of toxins in the body. In distribution assessment, EEKT flavonoid compounds tend to be normally distributed, this can be concluded from the assessment of VDss, fraction unbound, BBB permeability, and CNS permeability. Substances that become substrates indicate that these compounds can be metabolized by CYP 450 which is an important detoxifying enzyme in the body, while compounds that can act as inhibitors can suppress their metabolic activity. All EEKT flavonoid compounds were not affected by metabolism in the presence of CYP2D6 and could not act as inhibitors for CYP2D6. Excretion assessment, namely by measuring total clearance and renal OCT2 substrate levels, EEKT flavonoid compounds tend not to burden the kidneys or be toxic to the kidneys. In the assessment of toxicity, through testing Ames toxicity, Max tolerated dose of human, hERG I/II, LD50, the flavonoid compounds in EEKT tend to be non-toxic.