



**POTENSI ANTI-INFLAMASI GALANGIN DAN BETA PINENE
SENYAWA ALPINIA PURPURATA K.SCHUM TERHADAP
*Candida albicans***

**ANTI-INFLAMMATORY POTENTIAL OF GALANGIN AND BETA
PINENE COMPOUNDS OF ALPINIA PURPURATA K.SCHUM
AGAINST *Candida albicans***

Sakhiyah Sotya Paramita¹, Indah Rahmawati Afrida^{2*}, Ali Usman³

^{)Corresponding Author}*

FKIP Biologi Universitas Muhammadiyah Jember

*Email: indahrakhmawatiafrida@unmuhjember.ac.id

ABSTRAK

Inflamasi adalah kondisi yang ditandai oleh gejala kemerahan, nyeri, panas, dan pembengkakan, sering terjadi pada individu dengan sistem imun rendah. Laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) adalah salah satu tanaman yang memiliki sifat antiinflamasi. Kandungan bioaktifnya, seperti *Galangin* dan *Beta pinene*. Penelitian sebelumnya telah menunjukkan bahwa spesies *Alpinia* memiliki efek antiinflamasi yang signifikan. Penelitian ini bertujuan sebagai alternatif pengganti obat yang memiliki efek samping pada tubuh. Menggunakan metode *in silico* dengan melakukan analisis senyawa dan proses *docking* dengan ligan uji. Senyawa *Galangin* dan *Beta pinene* memiliki ikatan energi kuat dan stabil ikatannya dengan hasil *Beta pinene* -162,31 cal/mol dengan mengikat residu asam amino LEU475, ALA472, TYR231, CYS164 dan *Galangin* -258,73 cal/mol dengan mengikat residu asam amino LEU280, LYS279, ASP222, LYS83. Penelitian ini dapat dikembangkan untuk formulasi formulasi obat menggunakan laos merah (*Alpinia Purpurata* K.Schum) sebagai kandidat obat anti-inflamasi dengan mempertimbangkan dan mengevaluasi keefektifan dan keamanan senyawa tersebut dalam kondisi klinis.

Kata Kunci: Anti-inflamasi, *Candida albicans*, Senyawa Bioaktif, *Alpinia purpurata*.

ABSTRACT

Inflammation is a condition characterized by symptoms of redness, pain, heat and swelling, often occurring in individuals with a compromised immune system. Laotian red (*Alpinia purpurata* K.Schum) is a plant that has anti-inflammatory properties. Bioactive content, such as *Galangin* and *Beta pinene*. Previous research has shown that *Alpinia* species have significant anti-inflammatory effects. This research aims to provide an alternative to drugs that have side effects on the body. Using the *in silico* method by carrying out compound analysis and the docking process with the test ligand. *Galangin* and *Beta pinene* compounds have strong and stable bond energy with the result of *Beta pinene* -162.31 cal/mol by binding to amino acid residues LEU475, ALA472, TYR231, CYS164 and *Galangin* -258.73 cal/mol by binding to amino acid residue LEU280, LYS279, ASP222, LYS83. This research can be developed to formulate drug formulations using red laos (*Alpinia Purpurata* K.Schum) as an anti-inflammatory drug candidate by considering and evaluating the effectiveness and safety of the compound in clinical conditions.

Keywords : Anti-inflammatory, *Candida albicans*, Bioactive Compounds, *Alpinia purpura*.

PENDAHULUAN

Masalah Kesehatan di Indonesia terus mengalami peningkatan seiring berjalannya waktu. Indonesia merupakan negara yang beriklim panas dan lembab sehingga mendukung adanya pertumbuhan organisme, kapang dan khamir untuk berkembang biak yang mengakibatkan penyakit yang dapat menyerang imunologi tubuh (Ulfah *et al.*, 2024). Kasus yang sering terjadi terpaparnya infeksi yang diakibatkan oleh jamur dapat menyerang kulit, kuku, membran mukosa, dan tractus gastrointestinal. Penyakit ini tersebar luas di Indonesia dapat memengaruhi individu dari segala usia dan jenis kelamin. Jamur menjadi penyebab pada umumnya ditemukan tiap individu yang sehat sebagai bagian normal dari flora tubuh (Wiarata, 2019). Infeksi yang terpapar pada tubuh manusia dikarenakan berbagai faktor seperti virus, parasit, bakteri, trauma yang disebabkan oleh benda asing yang akan memicu reaksi inflamasi. Inflamasi atau peradangan merupakan penyakit yang mudah diderita oleh manusia yang memiliki imunologi rendah dengan timbulnya gejala kemerahan disertai dengan rasa nyeri, panas dan juga membengkak. Penyakit yang diakibatkan oleh erupsi obat juga dapat mengakibatkan reaksi pada imunologi sehingga diperlukannya pemahaman dasar dalam mengatasi masalah tersebut. Kandidiasis merupakan suatu infeksi yang disebabkan oleh mikroorganisme *Candida albicans*. Organisme ini tidak hanya tubuh pada rongga mulut tetapi juga dapat tumbuh pada saluran pencernaan pernafasan dan genital wanita (Kadek *et al.*, 2019).

Berkembangnya ilmu pengetahuan semakin banyak pengembangan obat antiinflamasi dalam bentuk obat oral dan topical. Obat yang dapat digunakan sebagai antiinflamasi berupa steroid dan non steroid (NSAID). Namun, penggunaan obat ini memiliki efek samping pada tubuh seperti menyebabkan sakit maag, efek diabetes, masalah pada ginjal, dan anemia (Emelda *et al.*, 2023). Oleh karena itu, adanya metode alternatif yang dapat menjadi pengganti obat untuk meminimalkan efek samping berupa pengobatan tradisional menggunakan tanaman herbal. Indonesia kaya akan tumbuhan yang memiliki potensi sebagai obat tradisional. Salah satu tanaman yang dapat dijadikan sebagai antiinflamasi adalah laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) yang memiliki kandungan senyawa bioaktif berupa *flavonoid*, *galangin*, *kuinon*, *tanin* dan juga *terpenoid* berpotensi menghambat aktivitas mikroorganisme yang mengakibatkan peradangan akibat *Candida albicans* (Mubarakah *et al.*, 2023). Spesies dari *Alpinia* dikenal sebagai ramuan obat yang telah dibuktikan oleh penelitian sebelumnya memiliki efek sebagai antiinflamasi (Wibawa *et al.*, 2023), analgetic dan aktivitas antikanker (Jayanti *et al.*, 2012). Penelitian ini bertujuan melakukan adanya prediksi dan riset senyawa bioaktif dari laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) sebagai antiinflamasi terhadap jamur *Candida albicans*.

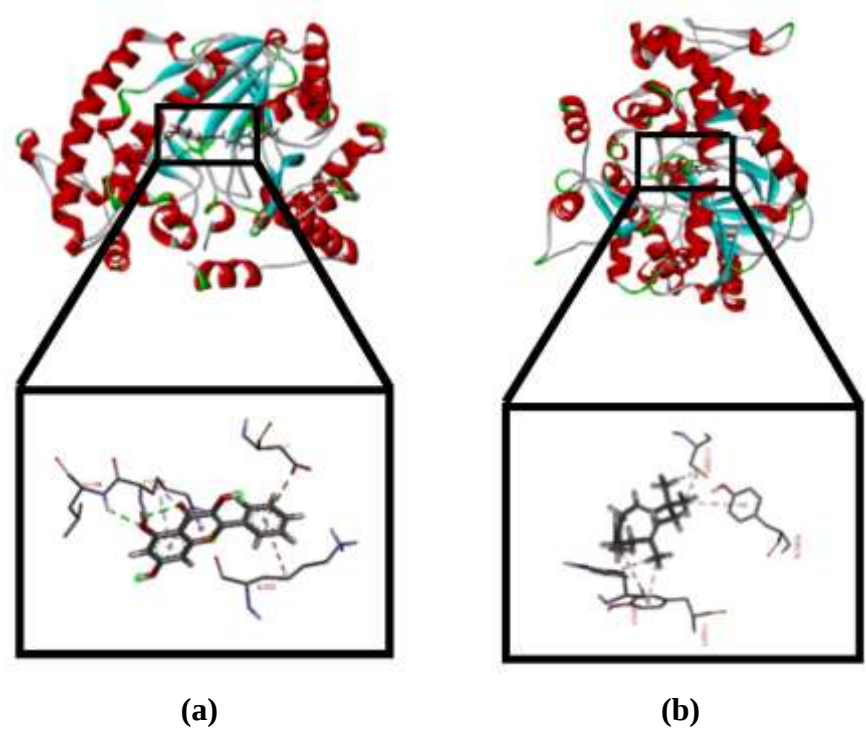
METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan perangkat berupa laptop dengan spesifikasi yang digunakan Laptop Toshiba dynabook RAM 4.00 GB dan *processor* Intel(R) Core(TM) i5-4300M CPU @ 2.60GHz 2.60 GHz. Perangkat lunak yang digunakan yaitu Pubchem, way2drug, Protein Data Bank (PDB), PyRx 0.8 dan BIOVIA *Discovery Studio* dengan bahan berupa artikel ilmiah, protein yang sudah dipreparasi, protein dengan ligand, protein tanpa ligan. Cara kerja penelitian ini berupa Pencarian Senyawa Aktif Pada Herbal : senyawa aktif dari laos merah (*Alpinia Purpurata* K.Schum) yang dipilih berdasarkan unduhan basis data dari KNApSACk pada situs web <http://www.knapsackfamily.com/knapsackcore/top.php>.

Analisis Aktivitas Senyawa : penganalisis melalui situs web dan server Pubchem <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dan <http://way2drug.com/passonline/predict.php>. Mencari *canonical smile* dari senyawa kimia. Senyawa yang telah diunduh dari PDB RCSB berupa *Candida albicans* (6AKZ) ditampilkan di jendela melalui Protein data bank lalu diunduh, truktur 3 dimensi dalam format file PDB , senyawa air dan faktor pendampingnya harus dihilangkan karena dapat mempengaruhi proses docking dengan ligan uji. Selanjutnya membuka aplikasi BIOVIA *Discovery Studio* untuk melakukan preparasi dengan menghapus bagian protein yang tidak dibutuhkan seperti water molecule dan disisakan reseptor dengan ligand. Selanjutnya disimpan dalam format file PDB. Selanjutnya preparasi protein clean yaitu protein tanpa ligand dan disimpan dalam format PDB, Setelah dilakukan preparasi protein tahapan terakhir yaitu melakukan *Docking* antara senyawa aktif dan protein menggunakan aplikasi PyRx 0.8.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Nilai energi ikat menggambarkan kekuatan interaksi antara senyawa dan reseptor. Semakin rendah nilai energi ikatan maka semakin kuat dan stabil ikatannya (Susanti *et al.*, 2019). Pada senyawa bioaktif laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) memiliki hasil ikatan dengan *Candida albicans* menghasilkan salah satu dari 20 asam amino yang umum ditemukan dalam protein. Termasuk senyawa Beta pinene dan Galangin yang dicantumkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Interaksi kompleks *Beta Pinene_C.albicans* (a) dan *Galangin_C.albicans* (b) residu asam amino

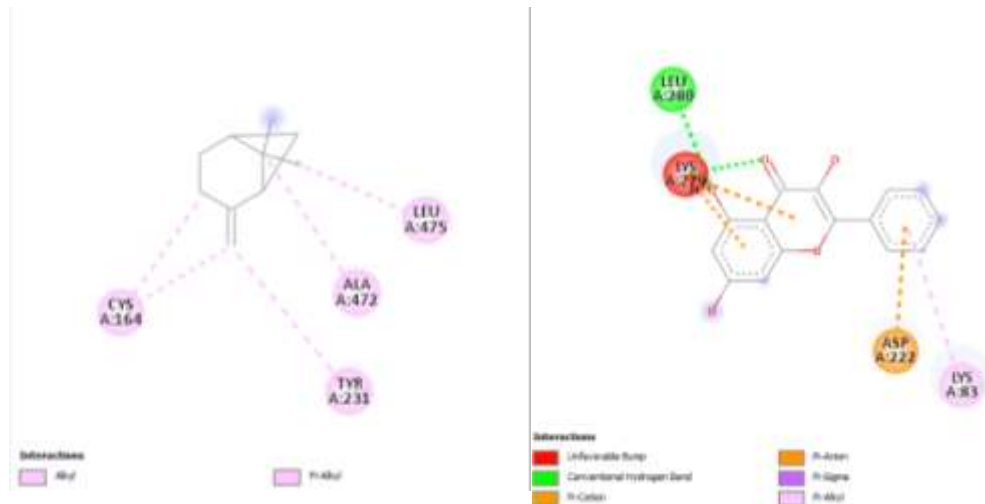
Asam amino merupakan senyawa yang sangat penting sebagai aditif dalam pakan dan makanan, meningkatkan cita rasa dan aroma, dalam pembuatan obat – obatan serta sebagai komponen penyusun obat, suplemen makanan, nutraceuticals, dan bahan kosmetik (Ismail *et al.*, 2018). Protein kompleks *Candida albicans* menunjukkan interaksi pada residu asam amino dari senyawa Galangin dan Beta – pinene. Pada kompleks *Galangin_C.albicans* melibatkan LEU 280, ASP 222, ASP 222, LYS 83 (Gambar 1a) yang mempunyai ikatan energi ikat sebesar -258.73 cal.mol dan kompleks *Beta-Pinene_C.albicans* melibatkan asam amino CYS 164, ALA 472, LEU 475, TYR 231 (Gambar 1b) dengan ikatan energi sebesar -162,31 cal/mol.

Tabel 1. Interaksi senyawa bioaktif laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) dengan *Candida albicans*

Interaksi Kompleks	Residu	Kategori	Energy Ikatan (cal/mol)
Beta pinene_Candida albicans	LEU ₄₇₅ , ALA ₄₇₂ , TYR ₂₃₁ , CYS ₁₆₄	Amino Acid	-162,31
Galangin_Candida albicans	LEU ₂₈₀ , LYS ₂₇₉ , ASP ₂₂₂ , , LYS ₈₃	Amino Acid	-258,73

Visualisasi dan analisis interaksi hasil docking dilakukan untuk memeriksa hasil penambatan antara ligan pembanding dan ligan uji yang digunakan. Hasil visualisasi ini

menggambarkan interaksi antara residu asam amino dengan ligan. Keberadaan interaksi asam amino ini memungkinkan terjadinya kontak antara ligan dan reseptor 6AKZ yang berkontribusi pada aktivitas penghambatan (Afrida *et al.*, 2021). Area pengikat (*Binding site*) merupakan bagian dari protein yang berinteraksi dengan ligan, mempengaruhi konformasi dan fungsi protein tersebut (Tabel 1.) . *Binding site* menunjukkan residu asam amino yang memiliki peran penting dalam membentuk interaksi dengan ligan, termasuk ikatan hidrogen, ikatan hidrofobik, dan ikatan elektrostatik (Sari Wulan *et al.*, 2020).



Gambar 2. Visualisasi struktur 3D

Ikatan hidrogen sangat penting dalam pengikatan ligan yang stabil di tempat pengikatan protein. Meskipun interaksi hidrogen kompleks perbedaan dalam kekuatan ikatan hidrogen dapat disebabkan oleh varias dalam konformasi molekuler yang diakses selama simulasi (Zahara *et al.*, 2021). Senyawa yang mengikat ikatan hidrogen adanya interaksi cincin aromatik melalui atom – atom yang mengandung hidrogen dengan akseptor seperti oksigen atau nitrogen (Zahara *et al.*, 2021) terdapat pada *galangin* dengan residu asam amino LEU 280 terdapat. Ikatan elektrostatik adalah ikatan ionic, merupakan jembatan garam atau ion antara gugus bermuatan berperan stabilitas protein dan berperan dalam pengikatan ligan atau substat (Elfi *et al.*, 2021). Ikatan elektristatik mengikat interaksi Alkyl dan pi – alkil yang membantu meningkatkan kontribusi elektrostatik terhadap afinitas pengikatan. Interaksi pi berperan dalam pengikatan inhibitor karena tidak terpengaruh oleh solvasi/desolvasi (Zahara *et al.*, 2021).

Visualisasi dari struktur 2D pada (gambar 2) dari hasil docking senyawa yang ada pada *Alpinia purpurata* K.Schum dengan menyangkutkan interaksi asam amino yang berada dalam *Candida albicans* menunjukkan bahwasanya interaksi senyawa dengan *Candida albicans* memiliki mekanisme ikatan berdasarkan gambar 2 menunjukkan bahwa ligan pembanding dari *Beta Pinene* dengan *Candida albicans* memiliki ikatan Alkyl dengan 4 residu asam amino yaitu

CYS 164, ALA 472, LEU 475, TYR 231 yang berperan dalam mempengaruhi aktivitas reseptor senyawa *Beta pinene*. Kemudian pada senyawa Galangin memiliki ikatan hydrogen dengan 1 residu asam amino yaitu LEU 280, ikatan Pi-Cation dengan 1 residu asam amino yaitu ASP 222, ikatan Pi-Anion dengan 1 residu asam amino yaitu ASP 222 dan ikatan Alkyl dengan 1 residu yaitu LYS 83 yang berperan dalam mempengaruhi aktivitas reseptor senyawa *galangin*.

Residu asam amino pada senyawa *Beta pinene* mampu mengoksidasi residu CYS (Sistein) membuat ikatan disulfida yang meningkatkan kestabilan protein dan memudahkan pembentukan struktur serat yang kuat (Ismail *et al.*, 2018). Residu ALA (Alanin) merangsang ikatan proliferasi limfosit dan timosit sehingga mampu mengurangi hilangnya fungsi sistem kekebalan tubuh (Arsic *et al.*, 2023). Residu LEU (Leusin) mengikat senyawa *Beta pinene* dan *Galangin* merupakan BCCA (*branched-Chain amino acids*) menjadi sumber potensial dari asetil-KoA yang mampu memetabolisme *Candida albicans* (Canfield & Bradshaw, 2020). Residu TYR (Tirosin) bersifat glukogenik berperan sebagai precursor untuk neurotransmitter penting seperti dopamine yang berperan dalam regulasi mood dan respon imun mengikat senyawa *beta pinene* (Canfield & Bradshaw, 2020). Senyawa Galangin mengikat residu ASP (aspartat) mengatur produksi sitokin dan mediator inflamasi (Holecek, 2023).

SIMPULAN

Berdasarkan penelitian disimpulkan bahwa laos merah (*Alpinia Purpurata* K.Schum) memiliki senyawa bioaktif yang efektif sebagai antiinflamasi terhadap *Candida albicans*. Efektifitas senyawa bioaktif dengan ketentuan memiliki hasil nilai energi ikat tertinggi Beta pinene sebesar -162,31 cal/mol sedangkan *Galangin* sebesar -258,73 cal/mol. Semakin rendah nilai energi ikat maka semakin kuat dan stabil ikatannya. Oleh karena itu, penelitian ini dapat dikembangkan untuk formulasi obat menggunakan laos merah (*Alpinia Purpurata* K.Schum) sebagai kandidat obat anti-inflamasi dengan mempertimbangkan dan mengevaluasi keefektifan dan keamanan senyawa tersebut dalam kondisi klinis.

DAFTAR PUSTAKA

- Afrida, I. R., Fatchiyah, Widodo, N., Amin, M., & Djath, S. M. (2021). Shogaol , Bisdemethoxycurcumin , dan Curcuminoid : Potensi Senyawa Zingiber Melawan COVID-19. *Biointerface Research in Applied Chemistry*, 11(5), 12869–12876.
- Arsic, A., Krstic, P., Paunovic, M., Nedovic, J., Jakovljevic, V., & Vucic, V. (2023). Anti - inflammatory effect of combining fish oil and evening primrose oil supplementation on breast cancer patients undergoing chemotherapy : a randomized placebo - controlled trial. *Scientific Reports*, 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-28411-8>.

- Canfield, C., & Bradshaw, P. C. (2020). *Translational Medicine of Aging Amino acids in the regulation of aging and aging-related diseases*. 3(2019), 70–89. <https://doi.org/10.1016/j.tma.2019.09.001>.
- Elfi, T. N., Bunga, Y. N., Bare, Y., Studi, P., Biologi, P., Nusa, U., & Indonesia, N. (2021). *Studi aktivitas biologi secara in silico senyawa nonivamide dan nordihydrocapsaicin sebagai anti inflamasi*. 8(2), 82–88.
- Emelda, E., Nugraeni, R., & Damayanti, K. (2023). Review: Exploration of Indonesian Herbal Plants for Anti Inflammatory. *INPHARNMED Journal (Indonesian Pharmacy and Natural Medicine Journal)*, 6(2), 58. <https://doi.org/10.21927/inpharnmed.v6i2.1938>.
- Holecek, M. (2023). *Roles of malate and aspartate in gluconeogenesis in various physiological and pathological states*. 145(April). <https://doi.org/10.1016/j.metabol.2023.155614>.
- Ismail, N. I., Hashim, Y. Z. H., Jamal, P., Othman, R., & Salleh, H. M. (2018). *Production of Cysteine : Approaches , Challenges and Potential Solution Production of Cysteine : Approaches , Challenges and Potential Solution*. October. <https://doi.org/10.6000/1927-3037.2014.03.03.3>.
- Jayanti, N. W., Astuti, M. D., Komari, N., & Rosyidah, K. (2012). *Isolasi dan Uji Toksisitas Senyawa Aktif dari Ekstrak Metilena Klorida (Mtc) Lengkuas Putih (Alpinia galanga L Willd)*. 5(L), 100–108.
- Kadek, N., Sari, Y., Agung, A., Putri, A., Luh, N., & Sumadewi, U. (2019). Uji Aktivitas Anti Fungi Ekstrak Daun Kamboja Putih (*Plumeria acuminata*) terhadap Pertumbuhan Jamur *Candida albicans* Anti Fungi Activity Test of White Cambodia Leaf Extract (*Plumeria acuminata*) Against Mushroom Growth *Candida albicans*. *Jurnal Media Sains*, 3(1), 28–31.
- Mubarokah, A., Kurniawan, & Kusumaningtyas, N. M. (2023). Penetapan Kadar Senyawa Flavonoid Ekstrak Etanol 96 %, Metanol 96 %, Etil Asetat 96 % Rimpang Lengkuas Merah (*Alpinia purpurata* K . Schum). *Jurnal Ilmiah Global Farmasi*, 1–8.
- Sari Wulan, I., Junaidin, & Pratiwi, D. (2020). *Studi Molecular Docking Senyawa Flavonoid Herba Kumis Kucing (Orthosiphon stamineus B) Pada Reseptor .- Glukosidase Sebagai Antidiabetes Tipe 2*. VII(2), 54–60.
- Susanti, Saputra, Parahyangan, & Amarawati. (2019). Molecular Docking Likopen Sebagai Antiosteoporosis Secara In Silico. *Jurnal Kimia (Journal Of Chemistry)*, 29–33.
- Ulfah, M., Irawan, A., Ningsih, L., Tinggi, S., Kesehatan, I., & Cirebon, M. (2024). *Aktivitas Antijamur Fraksi Etil Asetat Bunga Kamboja Merah (Plumeria rubra) terhadap Jamur Candida albicans DAN Trichophyton rubrum (Antifungal Acivity of The Ethyl Acetate Fraction of Red Frangipani Flowers (Plumeria rubra) against Candida albicans*. 7(2), 732–738.
- Wiarata, G. (2019). *Kandidosis kutis*. Fakultas Kedokteran Universitas Udayana.

- Wibawa, A., Yodha, M., Setiawan, M. A., Tee, S. A., Wulaisfan, R., Arnas, M., Siregar, L. W., Nurhikma, E., & Fauziah, Y. (2023). *Standarisasi Ekstrak Rimpang Wundu Watu (Alpinia monopleura) dan Aktivitasnya sebagai Antiinflamasi Secara In Vitro*. 9(2), 501–513.
- Zahara, S., Azmi, K., Rahmah, S. A., Andriani, M., Farobi, R. L., Luke, A., & Ahlina, N. U. R. (2021). *Analisis Aktivitas Inhibisi Kuersetin Pada Bawang Merah (Allium cepa L .) terhadap Penetrasi SARS-CoV-2 Menggunakan Metode Molecular Docking*. November, 328–335.