

## INTISARI

Kencur (*Kaempferia galanga* L.) merupakan salah satu tanaman yang kandungan senyawa aktifnya berpotensi untuk dijadikan sebagai *lead compound*. Salah satu kandungan utama dari kencur adalah Etil p-metoksisinamat (EPMS). Secara empiris kencur digunakan sebagai obat asma. Target reseptor penyakit asma salah satunya adalah AChM<sub>3</sub>. Terkait kandungan utama dan kegunaannya secara empiris, maka perlu diadakan penelitian mengenai sifat antagonisme EPMS terhadap reseptor AChM<sub>3</sub>.

Penelitian ini menggunakan studi *in vitro* dan *in silico*. Studi *in vitro* dilakukan pengamatan persentase kontraksi dan relaksasi otot polos trakea *Cavia porcellus* terisolasi saat dilakukan pemberian EPMS dengan konsentrasi 100 µM dan 200 µM. Uji ini menggunakan obat pembanding yaitu Atropin dengan perlakuan yang sama. Hasil uji dilihat dari nilai pD<sub>2</sub> kemudian dianalisis secara statistik menggunakan uji One Way ANOVA dengan taraf kepercayaan 95%. Uji *in silico* dilakukan dengan *docking* molekuler menggunakan aplikasi *Autodock Vina* dengan ligan EPMS dan reseptor AChM<sub>3</sub>. Hasil uji *in silico* dilihat dari skor *docking* dan jenis ikatan yang mengikat pada ligan dan reseptor. Uji ini menggunakan pembanding Atropin dan *native ligand* Tiotropium.

Hasil penelitian menunjukkan EPMS terbukti memiliki aktivitas antagonisme non kompetitif terhadap reseptor AChM<sub>3</sub> baik dari uji *in vitro* maupun *in silico*. Nilai pD<sub>2</sub> mengalami penurunan signifikan mulai dari pemberian konsentrasi 100 µM. Terdapat satu ikatan sama yang mengikat AChM<sub>3</sub> dengan ketiga ligan uji, yaitu ARG C:1095. Skor *docking* dari EPMS (-5,2) lebih tinggi dibandingkan dengan skor Atropin (-6,1) dan *native ligand* Tiotropium (-5,9). Hal ini menunjukkan EPMS memiliki aktivitas antagonisme terhadap AChM<sub>3</sub> namun daya ikat dari EPMS tidak lebih kuat dibandingkan Atropin dan Tiotropium. Kesimpulan dari penelitian ini EPMS memiliki aktivitas antagonisme terhadap reseptor AChM<sub>3</sub> pada trakea *Cavia porcellus*, namun senyawa ini memiliki aktivitas yang tidak lebih kuat dari Atropin.

**Kata Kunci:** Asetilkolin, *in vitro*, *in silico*, etil p-metoksisinamat, trakea.

## ABSTRACT

*Kencur* (*Kaempferia galanga* L.) is one of the plants that has an active compound. The active compound has the potential to be used as a *lead compound*. One of the main compounds of *kencur* is Ethyl p-methoxycinnamate (EPMS). Empirically, *kencur* is used as an asthma medication. One of the asthma receptor targets is AChM<sub>3</sub>. Regarding its main content and empirically use, it is necessary to conduct research on the antagonism nature of EPMS towards AChM<sub>3</sub> receptors.

This research implemented *in vitro* and *in silico* studies. *In vitro* studies were carried out by observing the percentage of contraction and relaxation of isolated *Cavia porcellus* tracheal smooth muscle when given EPMS with concentrations of 100 µM and 200 µM. This test utilized a comparison drug, namely Atropine with the same treatment. The test results could be seen from the pD<sub>2</sub> value which then were statistically analyzed using the One Way ANOVA test with a 95% confidence level. *In silico* test was carried out by doing the molecular *docking* using the *Autodock Vina* application with EPMS ligands and AChM<sub>3</sub> receptors. *In silico* test results could be seen from the *docking* score and the type of bond that binds to the ligand and receptor. This test applied comparison of Atropine and Tiotropium *native ligands*.

The results showed that EPMS was proven to have non-competitive antagonistic activity against AChM<sub>3</sub> receptors from both *in vitro* and *in silico* tests. The pD<sub>2</sub> value decreased significantly starting from administering a concentration of 100 µM. There was one same bond that bound AChM<sub>3</sub> with the three test ligands, namely ARG C: 1095. The *docking* score of EPMS (-5.2) was higher compared to the score of Atropine (-6.1) and Tiotropium *native ligand* (-5.9). It indicated that EPMS had antagonistic activity against AChM<sub>3</sub>. However, the binding capacity of EPMS was not stronger than Atropine and Tiotropium. This study concluded that EPMS had an antagonistic activity against AChM<sub>3</sub> receptors on the *Cavia porcellus* trachea, but this compound had an activity that was not stronger than Atropine.

**Keywords:** Acetylcholine, *in vitro*, *in silico*, ethyl p-methoxycinnamate, trachea.