

**ANALISIS EFEKTIVITAS SENYAWA AKTIF BEBERAPA TANAMAN
SEBAGAI AFRODISIAK MELALUI PENAMBATAN
MOLEKUL TERHADAP RESEPTOR *HUMAN*
*PHOSPHODIESTERASE 5***

Tia Destari Murti
Program Studi S1 Farmasi
Universitas Al-Irsyad Cilacap

ABSTRAK

Disfungsi ereksi merupakan ketidakmampuan yang persisten dalam mencapai atau mempertahankan ereksi yang cukup untuk kinerja seksual. Berdasarkan evaluasi efek samping yang terjadi dari penggunaan sildenafil sebagai obat *inhibitor human phosphodiesterase 5* (HPDE5) telah mendorong pencarian terus-menerus untuk senyawa baru yang berpotensi sebagai afrodisiak. Tujuan penelitian ini yaitu untuk mengetahui interaksi senyawa aktif nilocitin, stigmasterol, protodioscin, icariin, yohimbine, dan ginsenoside terhadap reseptor HPDE5 sebagai afrodisiak. Selain itu untuk mengetahui visualisasi interaksi yang terjadi antara senyawa aktif niloticin, stigmasterol, protodioscin, icariin, yohimbine, dan ginsenoside yang diduga sebagai afrodisiak terhadap reseptor HPDE5. Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu eksperimental yang dilakukan secara *in silico* dengan penambatan molekul senyawa niloticin, stigmasterol, protodioscin, icariin, yohimbine dan ginsenoside terhadap reseptor HPDE5 yang dibandingkan dengan ligan pembanding sildenafil. Metabolit sekunder dari tanaman herbal yang berpotensi sebagai afrodisiak dilakukan *docking molekuler* terhadap reseptor HPDE5. Struktur metabolit tersebut disiapkan dengan mengunduh pada aplikasi PubChem dalam format SDF sedangkan protein HPDE5 yang digunakan dalam memprediksi energi ikatan molekul diunduh dari PDB (*Protein Data Bank*) dengan kode 2H42. Proses *docking* tersebut divalidasi dengan senyawa sildenafil melalui analisis parameter energi bebas (ΔG) dan visualisasi interaksi terhadap reseptor. Hasil dari penelitian ini adalah senyawa ginsenoside dan yohimbine dapat berinteraksi dengan reseptor HPDE5. Interaksi yang terjadi menghasilkan terbentuknya ikatan van der Waals, hidrogen, hidrogen karbon, sigma, sulfur anion kation, T-shape dan alkil. Senyawa aktif masing-masing memiliki energi ikatan sildenafil sebesar -9,5 kkal/mol; niloticin -7,8 kkal/mol; stigmasterol -10,7 kkal/mol; protodioscin -13,1 kkal/mol; icariin -11,1 kkal/mol; yohimbine -10,1 kkal/mol dan ginsenoside -12,1 kkal/mol dengan RMSD 0. Interaksi terhadap reseptor HPDE5 menghasilkan terbentuknya residu asam amino yang sama dengan ligan pembanding. Persamaan residu menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki aktivitas yang sama dan dapat diprediksi sebagai afrodisiak.

Kata kunci: Disfungsi ereksi, sildenafil, tanaman herbal afrodisiak, *in silico*, *human phosphodiesterase 5*

ANALYSIS OF THE EFFECTIVENESS OF THE ACTIVE COMPOUNDS OF SOME PLANTS AS APHRODISIACS THROUGH MOLECULAR TETHERING TO THE HUMAN PHOSPHODIESTERASE 5 RECEPTOR

Tia Destari Murti
Department of Pharmacy
University Al-Irsyad Cilacap

ABSTRACT

Erectile dysfunction is a persistent inability to achieve or maintain an erection sufficient for sexual performance. Based on the evaluation of the side effects that occur from the use of sildenafil as a human phosphodiesterase 5 inhibitor drug (HPDE5) has prompted a constant search for new compounds that have the potential to be aphrodisiacs. The purpose of this study was to determine the interaction of active compounds niloticin, stigmasterol, protodioscin, icariin, yohimbine, and ginsenoside against HPDE5 receptors as aphrodisiacs. In addition, to determine the visualization of the interactions that occur between the active compounds niloticin, stigmasterol, protodioscin, icariin, yohimbine, and ginsenoside which are suspected to be aphrodisiacs against HPDE5 receptors. The method used in this study was experimentally carried out in silico by tethering molecules of niloticin compounds, stigmasterol, protodioscin, icariin, yohimbine and ginsenoside against HPDE5 receptors compared with sildenafil-forming ligands. Secondary metabolites of herbal plants that have the potential to be aphrodisiacs are carried out molecular docking of hpde5 receptors. The structure of such metabolites is prepared by downloading on the pubchem application in PDB format while the HPDE5 protein used in predicting the energy of molecular bonds is downloaded from THE PDB (Protein Data Bank) with the code 2H42. The docking process was validated with sildenafil compounds through analysis of free energy parameters (ΔG) and visualization of interactions to receptors. The results of this study are that the compounds ginsenoside, protodioscin and yohimbine can interact with the HPDE5 receptor. The interactions that occur result in the formation of van der Waals bonds, hydrogen bonds, hydrogen carbon bonds, sigma, sulfur, anion, cation, t-shape and alkyl bonds. Each active compound has a sildenafil bond energy of -9,5 kcal/mol; niloticin -7,8 kcal/mol; stigmasterol -10,7; protodioscin 13,1 kcal/mol; icariin -11,1 kcal/mol; yohimbine -10,1 kcal/mol; and ginsenoside -12,1 kcal/mol with RMSD with a value of 0. The interaction with the HPDE5 receptor result in the formation of the same amino acid residue as the reference ligand. The residue equation shows that these compounds have the same activity and can be predicted as aphrodisiacs.

Keywords: *Erectile dysfunction, sildenafil, aphrodisiac herbs, in silico, human phosphodiesterase 5*