

JURNAL METAMORFOSA Journal of Biological Sciences

eISSN: 2655-8122

<http://ojs.unud.ac.id/index.php/metamorfosa>

Analisis *In Silico* dan Kuantitatif Senyawa Metabolit Sekunder Senyawa L-DOPA Pada Ekstrak Biji Dan Daun Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) menggunakan metode Spektrometri UV-VIS

*In Silico Analysis And Quantitative Of Secondary Metabolic Compounds L-DOPA Compounds In The Extract Of Seeds And Leaves Of Velvet Bean Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) using UV-VIS Spectrometry method*

Windatul Habibah^{1*}, Tintrim Rahayu², Majida Ramadhan³

^{1,2,3}Jurusan Biologi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Islam Malang, Indonesia

*Email: windatulhabibah@gmail.com

INTISARI

Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) merupakan tanaman yang menghasilkan bahan obat-obatan yang mengandung senyawa metabolit sekunder, salah satunya L-DOPA. Senyawa ini dapat digunakan untuk mengobati gangguan syaraf, racun ular, menambah berat badan dan kekuatan otot, serta sebagai obat cacing pada manusia. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis adanya senyawa L-DOPA pada spesies Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) menggunakan Spektrometri UV-VIS dan potensinya dalam analisis secara *in-silico*. Metode penelitian ini adalah metode deskriptif kuantitatif. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa L-DOPA menggunakan Spektrometri UV-VIS terdeteksi bahwa Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) mengandung senyawa L-DOPA dengan panjang gelombang 462 nm dengan absorbansi pada biji 2,210 dan daun 1,171. Hasil analisis *in-silico* diketahui bahwa pada spesies Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) pada bagian biji dan daun mengandung senyawa L-DOPA dan memiliki struktur molekul $C_9H_{11}NO_4$. Kesimpulan penelitian ini adalah adanya kandungan senyawa L-DOPA sebanyak 1,105 ppm/ 20 gram bij koro dan 0,5855 ppm/ 2 gram daun. Senyawa L-DOPA juga memiliki potensi aktivitas dalam analisis secara *in-silico*.

Kata kunci: Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.), analisi *In Silico*, L-DOPA, Spektrometri UV-VIS

ABSTRACT

Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) is a plant that produces medicinal ingredients containing secondary metabolites, one of which is L-DOPA. This compound can be used to treat nervous disorders, snake venom, increase body weight and muscle strength, and as an anthelmintic in humans. This study aimed to analyze the presence of L-DOPA in the Benguk Koro Bean (*Mucuna pruriens* D.C.) species using UV-VIS spectrometry and its potential in *in-silico* analysis. This research method is a quantitative descriptive method. The results showed that the L-DOPA compound using UV-VIS Spectrometry detected that the Koro Benguk Bean (*Mucuna pruriens* D.C.) contained L-DOPA with a wavelength of 462 nm with an absorbance of 2.210 seeds and 1.171 leaves. The results of the *in-silico* analysis showed that the Benguk Koro Bean (*Mucuna pruriens* D.C.) species in the seeds and leaves contained L-DOPA compounds and had a $C_9H_{11}NO_4$ molecular structure. The conclusion of this study is the presence of L-

DOPA compounds as much as 1.105 ppm / 20 gram of bij koro and 0.5855 ppm / 2 gram of leaves. The L-DOPA compound also has potential activity in in-silico analysis.

Keyword: *Benguk Koro Beans (Mucuna pruriens D.C.), In Silico analysis, L-DOPA, UV-VIS Spectrometry*

PENDAHULUAN

Ilmu pengetahuan telah berkembang pesat. Perkembangan ilmu pengetahuan ini membantu manusia memenuhi kebutuhan hidup. Penerapan metode *in silico* untuk menemukan senyawa dan memprediksi potensi senyawa adalah salah satunya. *In silico* adalah metode yang berguna di bidang farmakologi menggunakan perangkat komputer tunggal ini. Metode *in silico* meliputi data mining, modeling, molecular docking, dan penggunaan database. Uji *in silico* digunakan untuk mencari obat yang diuji dalam basis data molekuler Kanpsack dan Pubchem. Pubchem dapat digunakan untuk mempelajari struktur 3D. Data dapat dicari berdasarkan nama atau strukturnya, sehingga jika suatu senyawa diperoleh dengan mengekstraksi suatu bahan alam, maka dimungkinkan untuk mengetahui kebaruan senyawa tersebut dengan membandingkan strukturnya dengan database dan dengan membandingkan fungsinya (Ekins, dkk. 2017).

Basis data *in silico* dapat mencari senyawa berdasarkan nama atau strukturnya. 5-HTP, DMT, DMT-n-oksida, N,N-DMT, 5-MeO-DMT-n-oksida, nikotin bufotenin, bufotenin, beta-karbolin, nikotin, 5-hidroksitriptamin. Tanaman koro benguk juga mengandung senyawa genistein, yang terdapat pada isoflavon. Ini adalah senyawa yang berasal dari tumbuhan, kadang-kadang disebut fitonutrien yang ditemukan dalam kedelai dan kacang-kacangan. Zat ini memiliki sifat dan mekanisme kerja yang mirip dengan hormon estrogen wanita, dan diharapkan memiliki efek antioksidan yang kuat.

Tanaman polong-polongan tumbuh di semak, berumur satu tahun dan panjang 2-10 m. Daun bulat telur atau belah ketupat, tumpul, lobus-apikal, uban di kedua sisi, 5-17 x 3-10 cm. Kelopak berbentuk lonceng, tinggi lk 6 mm, gigi bawah lebih panjang dari bibir atas. Bunganya 3 pada tonjolan sumbu utama, dan

tangkainya 0,5-1 cm. Mahkota sering berwarna ungu tua, dengan panjang bendera 2–2,5 cm, telinga terlipat di pangkal, panjang sayap 3,5–4 cm, panjang lunas 3,5–4,5 cm, dan paruh kaku. Kepala sari gundul, bergantian panjang dan pendek. Bijinya tebal, panjang 5-10 cm, tidak bersayap, dengan 4 rusuk di setiap tiang dan rusuk membujur, dan 2 di antaranya di ujung (Steenis, 2005).

Tumbuhan koro benguk adalah tumbuhan merambat, berdaun lebar, bunganya berwarna putih, merah muda, atau ungu, polong dipenuhi rambut halus seperti beludru. Biji kulit bervariasi dari putih keabu-abuan, hitam, dan kuning kecokelatan bercak-bercak hitam, dan daging bijinya berwarna putih (Lampariello dan Lucia R, 2018). Kacang kara benguk (*Mucuna pruriens* D.C) adalah salah satu spesies Koro (Papilionidae). Biji kacang mengandung konsentrasi levodopa yang tinggi. Levodopa bertindak sebagai penambah libido (afrodisiak) karena merupakan titik awal untuk neurotransmitter dopamin yang mempengaruhi libido pada pria atau wanita. Di India, Dopamin Ayurveda digunakan sebagai obat alami untuk penyakit Parkinson (penuaan) dan untuk mengurangi stres. Kemungkinan menghasilkan efek psikedelik dari zat yang terkandung dalam biji kacang (Pramudiardja, 2019).

Mucuna pruriens D.C. juga mengandung zat yang disebut L-3,4-dihydroxyphenylalanine, yang telah terbukti membantu dengan penyakit Parkinson (L- DOPA). Levodopa (L-DOPA) merupakan prekursor asam amino dari katekolamin dopamin, norepinefrin dan epinefrin yang dimanfaatkan untuk penyembuhan bagi penderita Parkinson (Aldred, 2010).

Prekursor adalah zat atau bahan awal atau bahan kimia yang dapat digunakan sebagai bahan baku/penolong dalam proses pembuatan industri farmasi, atau efedrin, pseudoefedrin,

norefedrin/ fenilpropanolamin, ergotamin, bahan kimia dan bahan kimia yang dapat digunakan dalam pembuatan produk curah sebagai perantara untuk produk akhir yang mengandung narkotika dan psikotropika. Untuk mencegah penyalahgunaan, pembelian obat prekursor dibatasi atau memerlukan resep dokter, contoh obat prekursor seperti pseudoefedrin HCl (Kemenkes, 2015). Oleh karena itu, prekursor yang digunakan dalam penelitian yang dilakukan adalah menggunakan tanaman kacang korobenk (*Mucuna pruriens* D.C.) dalam bentuk senyawa yang disebut dopamin, L-DOPA. Dopamin adalah neuromodulator yang bekerja di otak.

Ekstraksi L-dopa pada biji Kara Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) dilakukan dengan cara ekstraksi. Ekstraksi adalah proses pemindahan komponen padat atau cairan lain, atau pelarut ke cairan lain, atau pelarut ke cairan lain. Ekstraksi padat-cair sering disebut maserasi. Laju maserasi menunjukkan laju pergerakan zat terlarut dari satu fase ke fase lainnya. Menurut Pinelo dkk, (2017), ada sejumlah variabel yang berdampak signifikan terhadap efisiensi perpindahan massa, antara lain ukuran partikel, kecepatan pelarut, dan jumlah sampel.

Penggunaan spektrofotometri UV-Vis sangat berkembang selama beberapa tahun terakhir, terutama di bidang analisis farmasi, karena penggunaannya memberikan instan, metode cepat, tersedia, hemat biaya, dan tinggi presisi. Mengingat fakta bahwa L-DOPA berasal dari berbagai tanaman, terutama *Mucuna pruriens* D.C., dan telah terbukti memiliki sifat yang lebih kuat daripada suplemen sintetis, metode yang efektif untuk mendeteksi L-DOPA dalam ekstrak herbal sangat diminati. Saat ini, sejumlah metode spektroskopi berdasarkan berbagai reagen kromogenik tersedia untuk mendeteksi L-DOPA dan katekolamin lainnya dalam sampel non-herbal. Dalam hal ini, penggunaan spektrofotometer UV karena mudah, andal, dan hemat biaya (Wunas, 2018).

Tujuan dari penelitian adalah Untuk menganalisis senyawa yang terkandung dalam Tanaman Kacang kara benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) melalui analisis *In Silico* dan

deteksi senyawa L-DOPA menggunakan metode spektrometri UV-VIS

BAHAN DAN METODE

1. Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Terpadu dan Halal Center Universitas Islam Malang. Penguji L-DOPA dengan spektrometri UV-Vis dan analisis *in silico* di lakukan di Laboratorium Kimia Universitas Islam Malang. Penelitian ini dilakukan pada bulan April sampai Juni 2022.

2. Pengambilan dan Pengolahan Sampel

Sebanyak 100 gram daun dan biji kacang kara benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) dalam bentuk herba segar dikumpulkan dan disortir basah. Herba yang disortir basah dibilas hingga bersih. Selain itu, tanaman dikeringkan dari air cucian dan dikeringkan di udara dalam wadah pengering. Selanjutnya Simplisia dihaluskan menggunakan blender untuk mendapatkan serbuk simplisia herba.

3. Ekstraksi daun dan biji Kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) (MWEL-1299)

Bubuk biji 20 gram dan daun 2 gram koro benguk mentah masing-masing dilarutkan dalam 60 mL dan 6 mL aseton (untuk menghilangkan lemak), diaduk selama selama 24 jam, pada suhu ruang. Bahan kemudian diekstrak dalam akuades-etanol (1:1) dan ditambahkan 0.5 mL asam askorbat 0,1%, dilakukan tiga kali. Residu dihilangkan dengan menyaring dan filtrat dikumpulkan kemudian dipekatkan.

4. Mendeteksi Senyawa L-DOPA dengan Spektrofotometer UV-Vis

a. Pembuatan Larutan Blanko

Pembuatan larutan blanko dengan mencampurkan 2 mL Natrium nitrat 3% dan 1 mL asam hidroklorit 1M, kemudian didiamkan selama 5 menit hingga warna kuning. Kemudian ditambahkan 3 mL Natrium hidoksida 1M dan didiamkan selama 5 menit hingga warna merah. Lalu ditambahkan air sebanyak 25 ml. Selanjutnya diukur panjang gelombang dengan panjang gelombang maksimal 400-800 nm dengan menggunakan spektrometri UV-VIS.

b. Penentuan Standar

Stok L-DOPA dibuat dengan melarutkan 10 mg L-DOPA dalam labu ukur. Dari serangkaian labu ukur 25 mL diambil masing-masing 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, dan 9 mL dari larutan stok L-DOPA yang sudah dilarutkan dengan aquades. Kemudian diambil 1 mL dan seterusnya dengan menambahkan dengan 2 mL Natrium nitrat 3% dan 1 mL asam hipoklorit, lalu didiamkan selama 5 menit hingga warna kuning. Kemudian ditambahkan 3 mL Natrium hidroksida dan didiamkan selama 5 menit hingga warna orange kemerahan. Selanjutnya diukur panjang gelombang maksimal 400–800 nm menggunakan Spektrometri UV-VIS dan dihasilkan panjang gelombang 462 nm.

c. Penentuan Larutan Sampel

Pembuatan larutan sampel dengan mencampurkan ekstrak biji dan daun dari Kacang Koro Benguk dengan mengambil 1 mL ekstrak dari biji dan 1 mL ekstrak daun, masing-masing ditambahkan 2 mL Natrium nitrat 3% dan mL asam hipoklorit 1M, selanjutnya didiamkan selama 5 menit hingga warna kuning. Kemudian ditambahkan 3 mL Natrium hidroksida 1N dan didiamkan selama 5 menit hingga warna orange kemerahan. Lalu ditambahkan air sebanyak 25 mL dan dilakukan tiga kali ulangan. Selanjutnya diukur panjang gelombang 462 nm dengan menggunakan spektrometri UV-VIS.

5. Analisis *In Silico*

a. Analisis Senyawa Aktif

Menganalisis senyawa aktif yang ada didalam spesies (*Mucuna pruriens* D.C.) dengan masuk pada webserver KNApSAcK (<http://www.knapsackfamily.com/KNApSAcK/>) atau dengan mengetikkan KNApSAcK pada kotak pencarian di browser. Lalu dipilih

KNApSAcK family pada kotak merah kemudian pilih “Core System”.

b. Profil Senyawa Aktif

Menentukan senyawa aktif dengan masuk pada webserver PubChem menggunakan link (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>). Atau bisa akses melalui NCBI dan masuk pada PubChem yang tersedia di NCBI, kemudian dicari senyawa aktif..

c. Kalkulasi Senyawa Aktif

Untuk melakukan kalkulasi dengan membuka webserver dengan masuk pada link (<https://www.molinspiration.com/>). Kemudian pilih “Calculation of molecular properties and prediction of bioactivity” pada kotak merah dan dimasukkan kode SMILES senyawa aktif.

d. Analisis Potensi Bioaktivitas Senyawa Aktif

Untuk menganalisis potensi bioaktivitas dengan masuk webserver Pass online melalui link (<http://www.pharmaexpert.ru/passonline/>), Kemudian pilih “GO for prediction” dan masukkan username dan password akan muncul potensi bioaktivitas dari senyawa aktif tersebut.

HASIL

1. Analisis Kuantitatif Senyawa L-DOPA

Analisis kuantitatif sebuah senyawa yang dilakukan dalam penelitian ini yaitu menggunakan metode spektrometri UV-VIS. Ekstrak L-DOPA dari biji dan daun kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) akan dideteksi mengenai senyawa L-DOPA yang terkandung dalam biji dan daun kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.). Metode spektrometri UV-VIS menggunakan larutan blanko untuk mengukur panjang gelombang sebagai acuan untuk menetapkan adanya senyawa L-DOPA pada biji dan daun kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.).

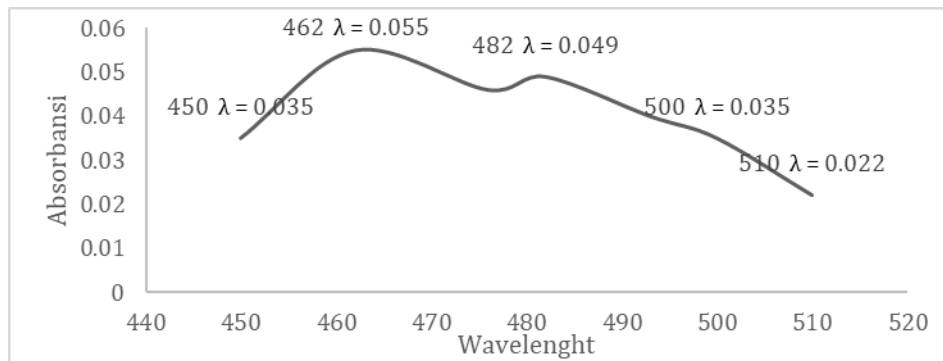
Tabel. 1 Hasil Ekstraksi Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.)

Sampel	Berat Sampel (gram)	Total Pelarut (ml)	Ekstrak (gram)	Rendemen (%)
Biji	20	100	4	0.2
Daun	2	10	0.006	0.003

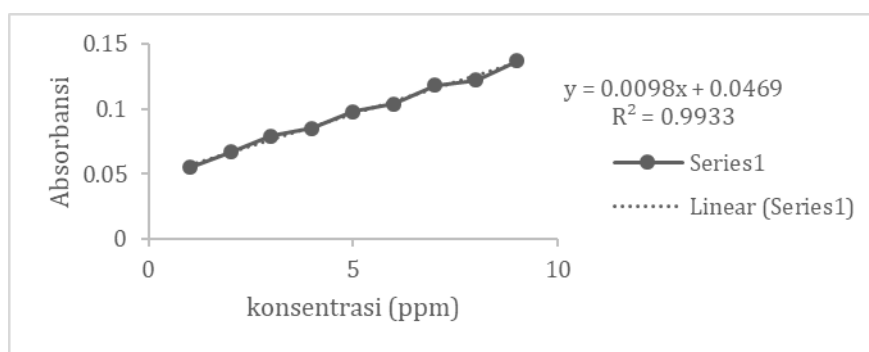
Berdasarkan hasil pengamatan dari standart dan pengamatan pada biji dan daun

kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) dengan menggunakan metode spektrometri

UV-VIS diperoleh data seperti disajikan pada Gambar 1 dan Gambar 2.



Gambar 1. Hasil Penentuan Panjang Gelombang Maksimal Standar Senyawa L-DOPA



Gambar 2. Kurva Kalibrasi Standart L-DOPA pada Panjang Gelombang 462 nm

Pengukuran pada serapan panjang gelombang maksimum dilakukan running dari panjang gelombang 400 – 800 nm. Hasil running menunjukkan panjang gelombang maksimum standar dari L-DOPA gambar 3 berada pada panjang gelombang 462 nm. Pengukuran terhadap standart tersebut, dapat dilihat bahwa meningkatnya absorbansi yang

diperoleh maka semakin tinggi pula absorbansi yang didapatkan. Hasil baku L-DOPA Gambar 2 yang diperoleh diplotkan antara konsentrasi dengan absorbansinya, sehingga diperoleh persamaan linier $y = 0,0098x + 0,0469$ dengan R^2 yang diperoleh sebesar $R^2 = 0,9933$ dengan $r = 0.996$.

Tabel 2. Hasil Serapan Absorbansi pada biji kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) dengan panjang gelombang maksimal 462 nm

Sampel.	Lamda	ppm	Abs	Abs Blanko
1			2.126	0
2	462	2	2.265	0
3			2.239	0
Rata ²	462	2	2.210	0

Tabel 3. Hasil Serapan Absorbansi pada daun kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) dengan panjang gelombang maksimal 462 nm

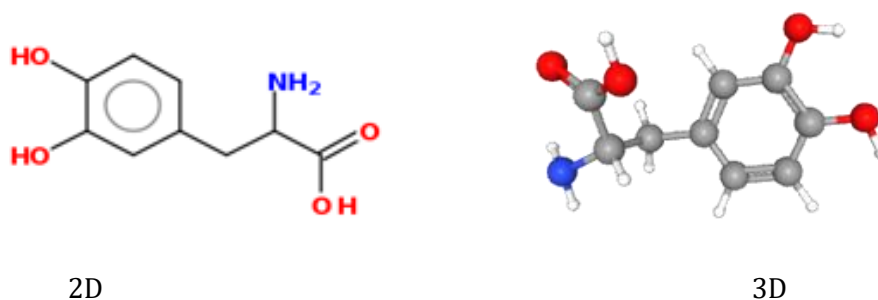
Sampel.	Lamda	ppm	Abs	Abs Blanko
1			0.968	0
2	462	2	1.134	0
3			1.412	0
Rata ²	462	2	1.171	0

Pada penelitian ini menggunakan dua sampel yaitu ekstrak biji dan daun kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.), untuk sampel standart levodopa didapatkan dengan panjang gelombang 462 nm. Pada serapan absorbansi blanko memiliki serapan absorbansi 0. Untuk penelitian pada biji memiliki serapan sebesar 1.063, 1.1325 dan 1.1195 ppm secara berurutan. sedangkan untuk sampel daun memiliki serapan sebesar 0.567, 0.484 dan 0.706 ppm secara berurutan.

2. Analisis In Silico

Analisis *In Silico* pada tumbuhan kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C) dilakukan dengan metode pubchem, Molinspiration dan Pass Online untuk mengetahui metabolit sekunder dan struktur molekul juga dapat diperoleh melalui Knapshack. Metabolit sekunder pada kacang koro benguk (*Mucuna*

pruriens D.C) yang diuji melalui *In Silico* terdapat asam amino, flavonoid, isoflavone dan alkaloid. Metabolit sekunder yang terkandung dalam senyawa aktif kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) sebanyak 13 senyawa aktif yang mempunyai struktur molekul yang beragam Tabel 1. Pada analisis *in-silico* ada Senyawa yang spesifik yaitu berupa Senyawa 5-Hydroxytryptamine Tabel 2. Dalam penelitian yang dilakukan dengan menggunakan Pubchem dapat diketahui bahwa senyawa aktif L-DOPA terdapat di kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) dengan SMILE C1=CC(=C(C=C1CC(C(=O)O)N)O)O serta struktur molekul tiga dimensi (3D) terdapat pada Gambar 1. L-DOPA adalah asam amino yang bersifat netral yang merupakan prekursor untuk katekolamin meliputi dopamine, norepinefrin dan epinefrin.



Gambar. 3 Struktur 2D dan 3D Senyawa L-DOPA

Calculation senyawa aktif L-DOPA dengan Molinspiration seperti disajikan pada Gambar 2 untuk memperhitungkan dasar molekul dengan diketahui miSMILES: C1=CC(=C(C=C1CC(C(=O)O)N)O)O meliputi:

miLogP	-2.20
TPSA	103.78
natoms	14
MW	197.19
nON	5
nOHNH	5
nviolations	0
nrotb	3
volume	172.00

Hasil prediksi skor bioaktivitas menggunakan miSMILES: NC(Cc1ccc(O)c(O)c1)C(=O)O untuk target obat dari senyawa L-DOPA yang paling penting meliputi:

GPCR ligand	-0.04
Ion channel modulator	0.39
Kinase inhibitor	-0.60
Nuclear receptor ligand	-0.17
Penghambat Protease	-0.01
Penghambat enzim	0.29

Tes Pass online yang dilakukan pada senyawa L-DOPA menunjukkan tingkat bioaktivitas yang sangat tinggi. Pass Online menggunakan parameter yang disebut Pa (probabilitas aktif)

untuk menunjukkan potensi aktivitas biologis suatu senyawa aktif. Hasil Pass Online ditunjukkan pada Tabel 3. Tabel 3 mengandung banyak bioaktivitas untuk bahan aktif L-DOPA.

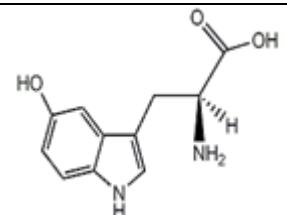
Hasil prediksi PASS dapat diinterpretasikan dengan cara yang berbeda, masing-masing dengan kelebihanannya sendiri. Jika $P_a > 0,7$, senyawa tersebut memiliki probabilitas aktivitas eksperimen yang sangat

tinggi, yang menunjukkan bahwa senyawa uji mungkin merupakan analog dari obat yang ada, dan jika $0,5 < P_a < 0,7$, senyawa tersebut memiliki probabilitas aktivitas eksperimen yang relatif rendah. dan zatnya cenderung berbeda dengan obat yang ada. Untuk $P_a < 0,5$, penemuan eksperimental aktivitas senyawa sangat tidak mungkin dan tidak ada obat yang ditemukan (Anand, 2017).

Tabel 3. Prediksi Aktifitas Biologis Menggunakan Analisis Molinspiration

Senyawa	Aktivitas biologis	Nilai P_a (Probable Activity)
L-DOPA	DOPA decarboxylase inhibitor	0,824
	Dopamin precursors	0,515
	Antiparkinsonian, tremor relieving	0,304

Tabel 4. Senyawa Metabolit Sekunder Spesifik Dalam Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.)

Nama Senyawa	Struktur Molekul	Golongan	Gambar Struktur
5-Hydroxytryptamine	$C_{10}H_{12}N_2O$	Asam Amino	

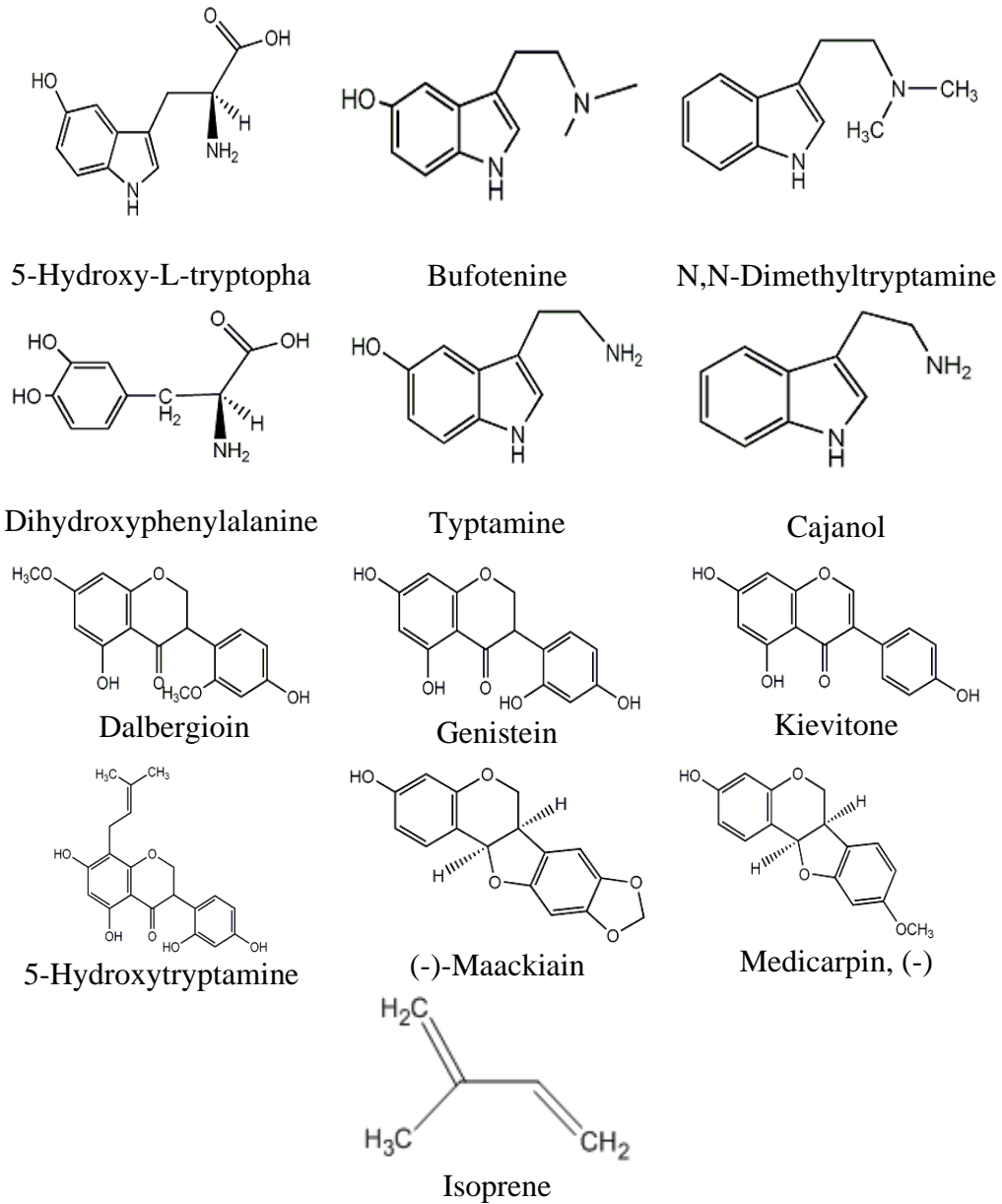
PEMBAHASAN

Biji dan daunnya digunakan sebagai tanaman koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.). Biji dan daun kacang benguk koro (*Mucuna pruriens* D.C.) sama bergizinya dengan kacang lainnya. Benguk mengandung karbohidrat dan protein, rendah lemak dan sangat tinggi lemak. Ini juga mengandung banyak zat bioaktif lainnya seperti triptamin, alkilamin, steroid, flavonoid kumarin, kardenolida, magnesium, tembaga, seng, mangan, dan besi. Ini juga mengandung senyawa L-DOPA, yang dapat

membantu mendiagnosis penyakit Parkinson, kondisi neurologis.

Menurut Tjitrosoepomo (2004) klasifikasi dari tumbuhan koro benguk *Mucuna pruriens* D.C. (Steenis, 2005) adalah sebagai berikut :

Kingdom : Plantae
 Divisio : Spermatophyta
 SubDivisio : Angiospermae
 Classis : Dicotyledoneae
 Ordo : Rosales
 Familia : Leguminosae/Papilionaceae
 Genus : *Mucuna*
 Spesiess : *Mucuna pruriens* D.C



Gambar 4. Struktur dari Senyawa yang ada dispecies Kacang Koro Benguk (*Mucuna pruriens* D.C.)



Gambar. 5 Biji Koro Benguk (Wulijarni dkk, 2017)

Analisis *in silico* untuk penemuan obat terbaru bertujuan untuk memprediksi, berhipotesis, dan memberikan penemuan terbaru dalam pengembangan kefarmasian, sehingga dengan menggunakan metode ini, para penemu telah diberikan langkah awal dalam menentukan senyawa obat baru yang akan diproduksi dan sarana tindak lanjut untuk meningkatkan efisiensi dalam mengoptimalkan aktivitas senyawa induk yang ada pada tanaman. Menurut Bare (2019), analisis *in silico* dilakukan dengan menggunakan teknik simulasi komputer untuk membantu penemu atau pengembang obat mengembangkan penemuan obat untuk mengelola obat yang lebih efisien dan andal.

L-DOPA, juga dikenal sebagai L-3,4-dihydroxyphenylalanine, adalah asam amino yang ditemukan di beberapa tumbuhan dan hewan. L-DOPA dibuat oleh asam amino L-tirosin, yang berasal dari enzim tirosin hidrosilase, yang menghasilkan protease dan protein utama dan dapat berkontribusi terhadap neurotoksisitas dari pemberian L-DOPA kronis (Becker, 2017).

L-DOPA digunakan mencegah timbulnya Parkinson, kadang-kadang disebut neuropati. Rumus molekul L-DOPA $C_9H_{11}NO_4$ merupakan metabolit amino non protein dengan berat molekul 197,19 g/mol dan titik leleh 270-284°C. Menurut Owen (2017), L-DOPA adalah padatan berwarna putih dan tidak berbau. Penelitian Samira (2018) menemukan bahwa L-DOPA standar pada biji bengugcolo (*Mucuna pruriens* D.C.) mengandung senyawa L-dopa dengan panjang gelombang 470 nm. Hal ini terlihat bahwa terdapat dua tahap. Panjang gelombang 470 nm diukur karena pada tahap pertama, saat pencampuran natrium nitrit dan HCl memberikan warna kuning yang tidak stabil. Pada tahap kedua pencampuran dengan NaOH memberikan warna merah yang stabil. Kestabilan senyawa NaOH disebabkan adanya kontribusi pasangan elektron ekstra yang tidak digunakan bersama saat berinteraksi dengan inti aromatik.

Deteksi senyawa L-DOPA dari ekstrak biji kacang benguk (*Mucuna pruriens* D.C. *pruriens* L.) diperoleh panjang gelombang

462nm. Ekstraksi L-DOPA biji dan daun benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) masing-masing memiliki absorbansi 1,105 dan 0,5855 ppm.

Menurut Ovallath (2017), L-DOPA merupakan prekursor untuk sintesis dopamin pada neuron dopaminergik di otak. Sejauh ini, L-DOPA telah menjadi standar emas dalam penemuan obat untuk pengobatan penyakit Parkinson, karena senyawa L-DOPA dapat melewati sawar darah-otak dan mencapai neuron dopaminergik. Penyakit parkinson dapat merenggut kaum muda sekitar usia 55 tahun dengan gejala klinis seperti tremor, bradikinesia, penurunan fungsi motorik, masalah keseimbangan tubuh, dan kesulitan berjalan. Gejala yang timbul disebabkan oleh kerusakan neuron dopaminergik di substansia nigra pars compacta atau gangguan pada jalur pensinyalan nigrostriatal. Pasien dengan penyakit Parkinson biasanya menerima terapi L-DOPA dengan dosis 150-2000 mg setiap hari, dengan terapi L-DOPA rata-rata 570,9 mg.

Senyawa L-DOPA dihasilkan dari L-tirosin pada aminoasma oleh enzim tirosin hidrosilase. L-DOPA bertindak sebagai L-tirosin dan dimasukkan ke dalam protein oleh sel L-tirosin. Sel L-Tirosin menghasilkan protease dan protein agregat *in vitro*, yang dapat berkontribusi terhadap neurotoksisitas karena pemberian L-DOPA secara kronis. Senyawa ini juga merupakan prekursor neurotransmitter monoamine norepinefrin dan adrenalin. Dopamin dibentuk oleh dekarboksilasi L-DOPA oleh aromatik L-amino acid decarboxylase (AADC). L-DOPA adalah senyawa prekursor yang mengandung pigmen melanin vital. Ketika enzim tirosinase mengkatalisis oksidasi L-DOPA menjadi dopakuinon, dopakuinon bersifat reaktif dan selanjutnya bereaksi menghasilkan atau menghasilkan oligomer melanin. Tirosinase dapat secara langsung mengubah tirosin dengan adanya zat pereduksi seperti asam askorbat (Becker, 2017).

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian pada spesies kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) memiliki senyawa metabolit sekunder

flavonoid, asam amin, alkaloid, terpenoid, dan isoflavon yang terdapat pada 13 senyawa yang terdeteksi. Lalu pada Pubchem diketahui bahwa mengandung senyawa L-DOPA dengan struktur molekul $C_9H_{11}NO_4$ dan termasuk dalam asam amino. Serta L-DOPA mempunyai bioaktivitas biologis yang tinggi dengan sebagai DOPA decarboxylase inhibitor. Sedangkan pada deteksi senyawa L-DOPA pada biji dan daun spesies kacang koro benguk (*Mucuna pruriens* D.C.) terdapat L-DOPA dengan menghasilkan 1.105 dan 0.5855 ppm.

DAFTAR PUSTAKA

- Aldred, J.; Nutt, J. 2010. Levodopa. *J. Med. Kimia*, 7 (6), 132–137.
- Bare, Y., Maulidi, A., Sari, D.R.T., Tiring, S.S.N.D. 2019. Studi in silico Prediksi Potensi 6-Gingerol sebagai inhibitor c-Jun N-terminal kinases (JNK). *Jurnal Jejaring Matematika dan Sains*. 1(2): 59-60.
- Becker, Joseph W. 2017. *Proceedings Indian Academy of Sciences, Section A, Caplus*. 77(3), 99 -129.
- Ekins, S., Mestres, J., Testa, B. 2017. In Silico Pharmacology for Drug Discovery: Application to Targets and Beyond. *British Journal Pharmacology*. 152, 21-37.
- Lampariello, Lucia R. 2018. The Magic Velvet Bean of *Mucuna pruriens*. *Journal of Traditional Complementary Medicine*, 2(4), 331-339.
- Menteri Kesehatan, 2015. Peredaran, Penyimpanan, Pemusnahan dan Pelapuran narkotika dan Psikotropika dan Prekursor Farmasi No.3. Jakarta.
- Misra L., Wagner H. 2007. Extraction of bioactive principles from *Mucuna pruriens* seeds. *Indian Journal of Biochemistry and Biophysics*. 44: 56-60.
- Ovallath, Sujith; Sulthana, Bahiya (2017). Levodopa: History and Therapeutic Applications. *Annals of Indian Academy of Neurology*. 20 (3): 185–189.
- Owen, Sonia, 2017. Material Safety Data Sheet, Spectrum Chemical, New Jersey.
- Pinelo, M., Fabbro, P. Del., Manzocco, Lara., Nicoli, M.J.N. dan Cristina, M. 2017. Optimization of continuous phenol extraction from *Vitis vinifera* by products. *Food Chemistry*. 92: 109–117.
- Pramudiardja, U., 2019. Kara Benguk Untuk Kejantanan Pria. Dalam: <http://health.detik.com/read/2011/02/21/170159/1575374/763/karabengukuntuk-kejantanan-pria?1771108bcj&u18=1>. Dikutip tanggal 24 Februari 2018.
- Samira, dkk. 2018. Mengevaluasi Kecendeungan Akumulasi L-DOPA Pada Biji Berkelumbutan Gelap dan Suspensi Budaya (*Phaseolus vulgaris* L) dengan Metode Spektrometri Efisien. *Quim, Nova*. Vol. 41, 4, 366-393.
- Steenis, V, C.G.G.j. 2005. *Flora*. Jakarta. PT Pradnya Pramita.
- Tjitrosoepomo G., 2004. Taksonomi tumbuhan (Spermatophyta). Yogyakarta. Gadjah Mada University Press.
- Wulijarni-Soetjipto, N. dan Maligalig, R.F. 2017. Klasifikasi *Mucuna pruriens* pada. (http://proseanet.org/prosea/e-prosea_detail.php?frt=&id=63) diunduh pada 23 Maret 2014.