

ANALISIS DATA *DIFFERENTIALLY EXPRESSED GENES* (DEG) AKIBAT TERPAPAR NIKOTIN DAN IDENTIFIKASI METABOLIT SEKUNDER MINYAK ATSIRI KEMANGI MENGGUNAKAN GC-MS, SERTA PREDIKSI POTENSI AKTIVITAS SECARA *IN SILICO*

Munawwarah, Program Studi Magister Farmasi, 2024

Pembimbing: (I) Azminah

ABSTRAK

Nikotin adalah unsur kimia aktif utama dalam asap rokok yang menyebabkan kecanduan. Paparan nikotin dalam jangka waktu yang lama telah terkonfirmasi sebagai penyebab perubahan dalam ekspresi gen yang berkaitan dengan fungsi metabolisme dan modifikasi saraf di otak. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis target reseptor akibat paparan nikotin melalui analisis *Differentially Expressed Genes* (DEG) dan mengidentifikasi metabolit sekunder minyak atsiri kemangi (*Ocimum basilicum* L.) menggunakan GC-MS, serta prediksi potensi aktivitas terhadap reseptor spesifik dan senyawa target terapi secara *in silico* (*molecular docking* dan *molecular dynamic*). Hasil analisis DEG mengidentifikasi adanya reseptor *nicotinic acetylcholine* (nAChRs) sub tipe $\alpha 4$ - $\beta 2$ dengan kode PDB 6PV7 sebagai target reseptor. Hasil identifikasi senyawa menggunakan GC-MS mengidentifikasi 31 metabolit sekunder minyak atsiri kemangi. Hasil analisis ADMET dan *molecular docking* menunjukkan metabolit sekunder beta-bisabolene sebagai senyawa target terapi. Hasil prediksi potensi aktivitas metabolit sekunder beta-bisabolene terhadap reseptor *nicotinic acetylcholine* (nAChRs) sub tipe $\alpha 4$ - $\beta 2$ menunjukkan struktur yang kompak dan stabilitas yang lebih baik dari obat. Hasil ini mendukung potensi minyak atsiri kemangi sebagai terapi alternatif untuk mengatasi dampak negatif paparan nikotin.

Kata Kunci: Ekspresi gen, *In silico*, nAChRs, beta-bisabolene

ANALYSIS OF DIFFERENTIALLY EXPRESSED GENES (DEG)
DATA DUE TO NICOTINE EXPOSURE AND IDENTIFICATION OF
BASIL ESSENTIAL OIL COMPOUNDS USING GC-MS,
ALONG WITH IN SILICO ACTIVITY PREDICTION
Munawwarah, Program Studi Magister Farmasi, 2024
Pembimbing: (I) Azminah

ABSTRACT

Nicotine is the main active chemical component in cigarette smoke that causes addiction. Prolonged exposure to nicotine has been confirmed to cause changes in gene expression related to metabolic functions and neural modifications in the brain. This study aims to analyze receptor targets resulting from nicotine exposure through Differentially Expressed Genes (DEG) analysis and to identify secondary metabolites in basil essential oil (*Ocimum basilicum* L.) using GC-MS, as well as to predict potential activity against specific receptors and target therapeutic compounds in silico (molecular docking and molecular dynamics). DEG analysis identified the nicotinic acetylcholine receptor (nAChRs) subtype $\alpha 4$ - $\beta 2$ with PDB code 6PV7 as the receptor target. GC-MS compound identification revealed 31 secondary metabolites in basil essential oil. ADMET and molecular docking analyses identified beta-bisabolene as the target therapeutic compound. The predicted potential activity of beta-bisabolene against the nicotinic acetylcholine receptor (nAChRs) subtype $\alpha 4$ - $\beta 2$ showed a compact structure and better stability than the drug. These findings support the potential of basil essential oil as an alternative therapy to mitigate the negative effects of nicotine exposure.

Keywords: Differentially Expressed Genes, In silico, nAChRs, beta-bisabolene