



## Eksplorasi Bioinformatika Senyawa *Myricetin* dari *Psidium guajava* dalam Penanggulangan Diare : Studi Fisikokimia, Farmakokinetik dan Toksikologi

Ayu Safitri<sup>1\*</sup>, Shafa Noer<sup>2</sup>,  
Universitas Indraprasta PGRI  
\*Email: ayupulo04@gmail.com

### Abstract

*Myricetin*, a flavonol compound found in *Psidium guajava*, has long been used in traditional medicine to treat digestive ailments such as diarrhea. This study aimed to investigate the pharmacological potential of *Myricetin* using a bioinformatics-based *in silico* approach by assessing its physicochemical properties, pharmacokinetics, and toxicity profile. Data were collected from the PubChem database, and further analysis was performed using SwissADME and ProTox 3.0. The compound exhibited good molecular characteristics, including a suitable molecular weight and moderate lipophilicity. However, its high TPSA and poor gastrointestinal absorption suggest limited oral bioavailability. *Myricetin* is not a substrate for glycoprotein P, which may enhance its intracellular retention. Predicted toxicity places it in toxicity class 3 (LD50 between 50–300 mg/kg), with potential hepatotoxic, neurotoxic, and CYP enzyme inhibition effects. Importantly, the drug exhibits low potential for mutagenic, carcinogenic, and immunotoxic activity. Overall, *Myricetin* shows promising pharmacological potential as an antidiarrheal agent, but more experimental studies are needed to confirm its safety and further clinical effectiveness..

**Keywords:** *Myricetin*, *Psidium guajava*, Diarrhea, SwissADME, ProTox 3.0, Bioinformatics, Flavonoids

### Abstrak

*Myricetin*, senyawa flavonol yang ditemukan dalam *Psidium guajava*, telah lama digunakan dalam pengobatan tradisional untuk mengobati penyakit pencernaan seperti diare. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi farmakologis *Myricetin* menggunakan pendekatan *in silico* berbasis bioinformatika dengan menilai sifat fisikokimia, farmakokinetik, dan profil toksisitasnya. Data dikumpulkan dari basis data PubChem, dan analisis lebih lanjut dilakukan menggunakan SwissADME dan ProTox 3.0. Senyawa tersebut menunjukkan karakteristik molekuler yang baik, termasuk berat molekul yang sesuai dan lipofilisitas sedang. Namun, TPSA-nya yang tinggi dan penyerapan gastrointestinal yang buruk menunjukkan bioavailabilitas oral yang terbatas. *Myricetin* bukanlah substrat untuk glikoprotein P, yang dapat meningkatkan retensi intraselulernya. Prediksi toksisitas menempatkannya dalam kelas toksisitas 3 (LD50 antara 50–300 mg/kg), dengan potensi efek hepatotoksik, neurotoksik, dan penghambatan enzim CYP. Yang penting, obat ini menunjukkan potensi rendah untuk aktivitas mutagenik, karsinogenik, dan imunotoksik. Secara keseluruhan, *Myricetin* menunjukkan potensi farmakologis yang menjanjikan sebagai agen antidiare, namun studi eksperimental lebih lanjut diperlukan untuk memastikan keamanan dan efektivitas klinisnya.

**Kata kunci:** *Myricetin*, *Psidium guajava*, diare, SwissADME, ProTox 3.0, bioinformatika, flavonoid

## PENDAHULUAN

*Psidium guajava*, atau yang sering dikenal dengan jambu biji, merupakan tanaman tropis yang telah lama dimanfaatkan dalam pengobatan tradisional, khususnya untuk mengatasi gangguan pencernaan seperti diare. Bagian yang banyak dimanfaatkan untuk bahan pengobatan adalah daunnya. Secara tradisional, masyarakat mengonsumsi pucuk daun jambu biji secara langsung atau merebusnya sebagai ramuan herbal. Seiring berkembangnya ilmu dan teknologi, ekstrak daun *Psidium guajava* juga telah diformulasikan dalam bentuk sediaan modern seperti kapsul, tablet, atau teh herbal, yang tetap mempertahankan senyawa aktif alaminya. Salah satu senyawa aktif yang terkandung di dalamnya adalah *Myricetin*, yang memiliki aktivitas antimikroba, antiinflamasi, dan antioksidan yang potensial (Kareem & Kadhim, 2024).

*Myricetin* merupakan salah satu kelompok *flavonol* bersama dengan *quercetin*, *kaempferol*, dan *isorhamnetin*. Senyawa ini menunjukkan berbagai aktivitas bahkan ampuh untuk melawan radikal bebas hingga pada konsentrasi terendah, dibandingkan dengan flavonoid lainnya (Agraharam et al., 2022). Dengan ini, *Myricetin* menunjukkan potensi sebagai agen antidiare karena aktivitas antimikrobanya dapat menghambat pertumbuhan patogen penyebab diare, dan efek antiinflamasinya dapat membantu menstabilkan mukosa usus. Namun, aktivitas biologis yang menjanjikan tidaklah cukup untuk menjadikan suatu senyawa sebagai kandidat obat. Diperlukan evaluasi terhadap parameter fisikokimia, farmakokinetik, dan toksikologinya guna menilai sejauh mana senyawa dapat diserap, didistribusikan, dimetabolisme, dieliminasi tubuh, serta keamanannya dalam penggunaan jangka pendek maupun panjang.

Adanya kemajuan teknologi, pendekatan bioinformatika khususnya pada analisis *in silico* menjadi salah satu cara yang ampuh dan sesuai dalam mengevaluasi kelayakan senyawa obat dari sumber alam. Bioinformatika merupakan cabang ilmu interdisipliner yang menggabungkan biologi, komputer, matematika, dan kimia untuk mengelola, menganalisis, dan menafsirkan data biologis dalam skala yang besar. Melalui pemanfaatan basis data seperti *PubChem* dan webserver seperti *SwissADME* dan *ProTox 3.0*, peneliti dapat melakukan analisis struktur kimia, prediksi sifat farmakokinetik seperti kelarutan, permeabilitas membran, dan *bioavailabilitas*, serta estimasi tingkat toksisitas suatu senyawa secara komprehensif (Banerjee et al., 2024; Daina & Zoete, 2016). Analisis ini tidak hanya mempercepat penemuan obat, melainkan mampu mengurangi kebutuhan akan uji coba laboratorium yang mahal dan memakan waktu. Untuk memastikan potensi terapeutik dan keamanan senyawa ini, dilakukan analisis bioinformatika yang terstruktur, mulai dari pencarian data senyawa, prediksi aktivitas biologis, identifikasi target molekuler, validasi struktur target, hingga evaluasi kelayakan dan toksisitas *in silico*.

Karenanya, penelitian ini berniat untuk mengeksplorasi kapasitas bioinformatika senyawa *Myricetin* dari *Psidium guajava* sebagai agen terapi diare, melalui analisis terhadap parameter fisikokimia, farmakokinetik, dan toksikologi. Hasil penelitian ini diharapkan mampu memberikan peran serta dalam pengembangan senyawa herbal yang efektif, aman, dan berdaya saing dalam bidang farmasi modern.

Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Komputer Unindra dengan pendekatan *in silico* berbasis bioinformatika. Kegiatan penelitian ini dilaksanakan mulai tanggal 19 Mei 2025, hingga 16 Juni 2025. Metode penelitian ini dimulai dengan pengumpulan data sekunder mengenai senyawa *Myricetin* yang berasal dari *Psidium guajava*. Informasi yang dikumpulkan mencakup struktur kimia, kode *canonical SMILES*, serta potensi aktivitas biologis senyawa.

Data senyawa *Myricetin* diperoleh dari basis data *PubChem* (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>), termasuk informasi struktur kimia, rumus molekul, berat molekul, serta kode *canonical SMILES*. Dilakukan analisis aktivitas biologis menggunakan *PASS Server* (<http://www.way2drug.com/PASSOnline/>), untuk memprediksi potensi senyawa terhadap aktivitas farmakologis berdasarkan struktur kimianya. Target molekuler senyawa ini diprediksi menggunakan *SwissTargetPrediction*. Struktur target protein divisualisasikan dan divalidasi menggunakan *Swiss-Model* (<https://swissmodel.expasy.org/>) dan webserver *SAVES v6.1* untuk memastikan kualitas model 3D berdasarkan parameter validasi Ramachandran plot dan lainnya. Langkah berikutnya adalah melakukan analisis kemiripan obat, sifat fisikokimia, dan farmakokinetik dengan menggunakan webserver *SwissADME* (<http://www.swissadme.ch/>). Kode *SMILES* yang diperoleh dimasukkan ke dalam kolom input, kemudian dianalisis terhadap berbagai parameter seperti

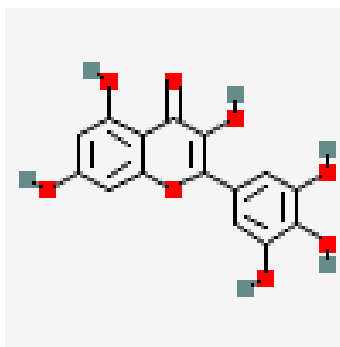
*physicochemical properties, lipophilicity, solubility, pharmacokinetics (ADME), drug-likeness, dan medicinal chemistry.* Tahap terakhirnya adalah analisis toksisitas senyawa *Myricetin* menggunakan webserver ProTox 3.0 (<https://tox.charite.de/protox3>).

Studi dilakukan dengan memasukkan data *SMILES* yang sama, kemudian mengamati parameter seperti kelas toksisitas, nilai LD50, organ *toxicity*, efek terhadap jalur reseptor dan metabolisme, serta potensi efek klinis dan lingkungan. Data ini dianalisis untuk mengevaluasi kelayakan dan risiko senyawa sebagai kandidat obat.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Hasil

Penelusuran terhadap senyawa *Myricetin* dilakukan melalui basis data *PubChem* yang dikelola oleh *National Center for Biotechnology Information (NCBI)*. *Myricetin* tercatat dengan *PubChem CID* 5281672 dan memiliki rumus molekul  $C_{15}H_{10}O_8$  serta berat molekul sebesar 318.24 g/mol. Senyawa ini termasuk dalam kelompok *flavonoid* dan secara alami ditemukan dalam berbagai tanaman, termasuk *Psidium guajava*, sudah lama digunakan sebagai pengobatan tradisional untuk mengatasi masalah pada pencernaan seperti diare. Struktur kimia *Myricetin* ditampilkan pada Gambar 1. Dan Salah satu informasi penting yang diperoleh dari *PubChem* adalah *Canonical SMILES*, yaitu: C1=CC(=C(C=C1C2=C(C(=O)C3=C(C=C(C=C3O2)O)O)O)O)O



Gambar 1. Struktur 2D senyawa *Myricetin*  
Sumber: *PubChem*, 2025

Kemudian dilakukan pengujian untuk menganalisis potensi senyawa *Myricetin*, seperti yang terlihat pada Gambar 2. Yang merupakan hasil *prediction PASS online* dengan  $pa > 0,3$  yang menandakan jika senyawa tersebut terbukti terlibat dalam aktivitas biologis.

All  Pa>Pi  Pa>0,3  Pa>0,7

Pa	Pi	Activity
0,984	0,001	Chlordecone reductase inhibitor
0,969	0,002	HIF1A expression inhibitor
0,967	0,001	2-Dehydropantoate 2-reductase inhibitor
0,968	0,002	Membrane integrity agonist
0,966	0,001	Peroxidase inhibitor
0,964	0,002	HMOX1 expression enhancer
0,963	0,001	Antimutagenic
0,961	0,001	Aryl-alcohol dehydrogenase (NADP+) inhibitor
0,959	0,002	Membrane permeability inhibitor
0,958	0,001	Kinase inhibitor

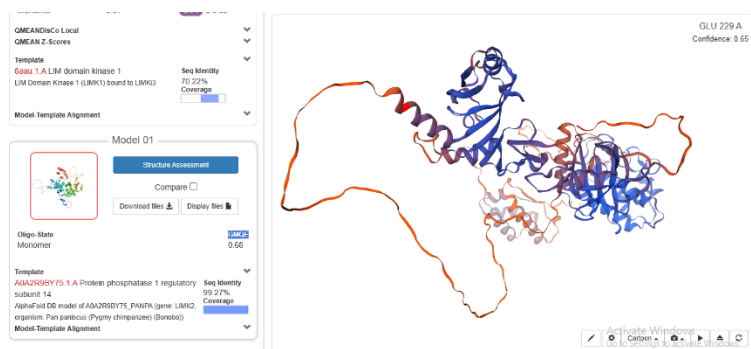
Gambar 2. Prediksi Potensi Senyawa *Myricetin*  
Sumber: *PASS online*, 2025

Kemudian dibutuhkan identifikasi protein target dari senyawa *Myricetin*, menggunakan *Swiss Target Prediction* dan didapatkan protein target yang memungkinkan yaitu LIM domain kinase 2.

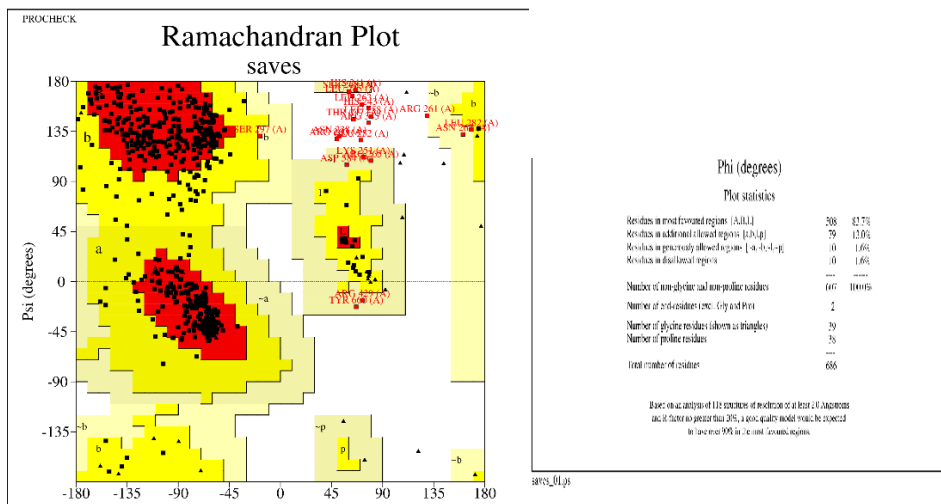


**Gambar 3.** Hubungan LIM domain kinase 2 dengan Protein lainnya  
 Sumber: String db, 2025

Langkah selanjutnya adalah memvalidasi struktur 3D protein target menggunakan *Swiss Model* (Gambar 4.) lalu melakukan analisis Ramachandran plot dengan hasil Residues in disallowed Regilions nya sebesar 1.6 % (Gambar 5.)

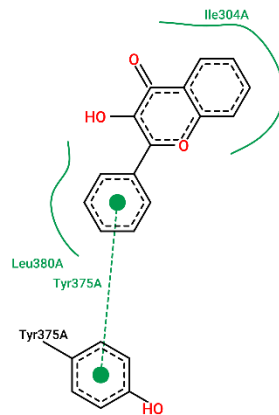


**Gambar 4.** Pemodelan Struktur Protein LIM domain Kinase 2  
 Sumber: *SWISS model*, 2025



**Gambar 5.** Hasil Ramachandran Plot Protein Target  
 Sumber: *SAVES webserver*, 2025

Selanjutnya didapatkan hasil dari docking antara protein dengan senyawa *Myricetin* menggunakan *webservice Protein Plus* yang sudah di docking di *PyMol* dan *PyRx* (Gambar 6.)



**Gambar 6.** Visualisasi 2D hasil docking  
 Sumber: *Protein Plus*, 2025

Langkah terakhir adalah menguji farmakokimia, fisikokimia dan toksisitas senyawa *Myricetin* menggunakan *SwissADME*, dan *ProTox*.



**Gambar 7.** Radar Bioavailabilitas dan Parameter ADME Senyawa *Myricetin*  
 Sumber: *SwissADME*, 2025

Hasil prediksi enzim metabolisme menunjukkan bahwa *Myricetin* menghambat enzim CYP1A2 dan CYP3A4, yang merupakan bagian dari keluarga enzim sitokrom P450 yang terlibat dalam metabolisme obat.

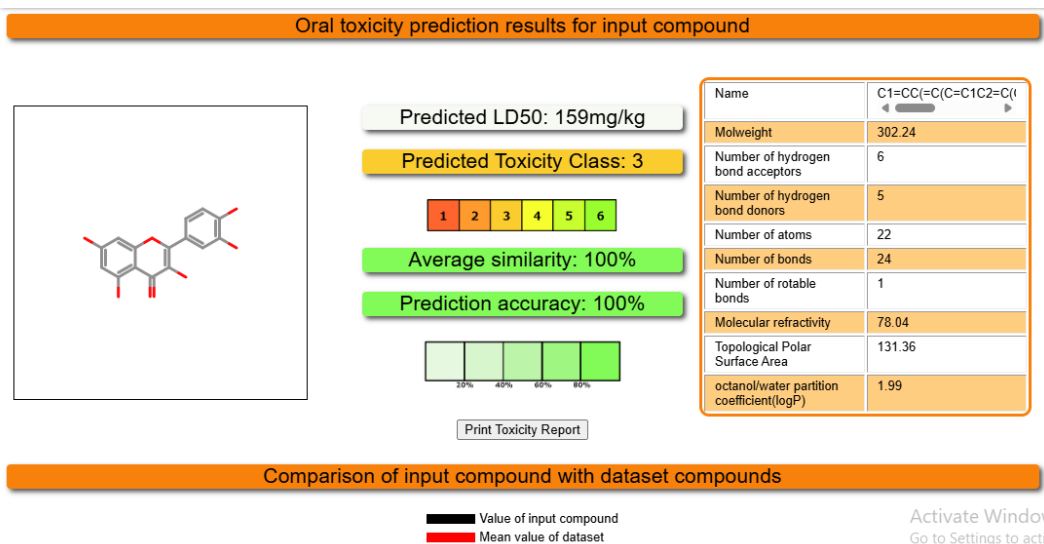


**Gambar 8.** Diagram BOILED-Egg Senyawa *Myricetin*  
 Sumber: SwissADME, 2025

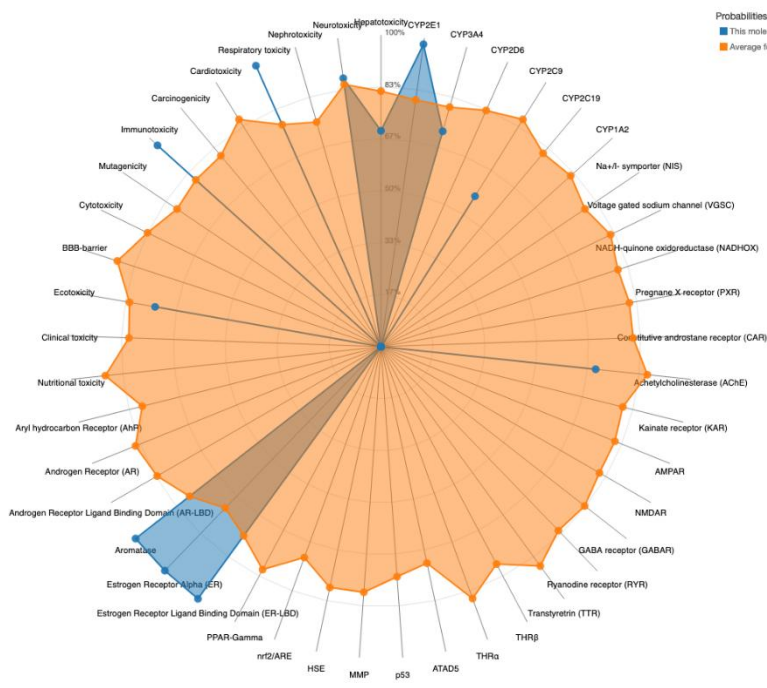
Untuk memperkuat prediksi farmatokinetik, dilakukan analisis menggunakan fitur *BOILED-Egg* pada *SwissADME*, yang memetakan senyawa berdasarkan nilai WLOGP (lipofilisitas) dan TPSA (polaritas) ke dalam dua area utama: putih (white) dan kuning (yolk). Area putih merepresentasikan molekul yang diprediksi memiliki penyerapan gastrointestinal yang baik (HIA+), sedangkan area kuning menunjukkan molekul yang berpotensi menembus penghalang darah-otak (BBB+). Berdasarkan gambar BOILED-Egg yang di dapatkan pada senyawa *Myricetin* (Gambar 3), ditampilkan sebagai titik merah (PGP-) yang berada di luar kedua area tersebut, yang menandakan:

- *Myricetin* tidak termasuk senyawa yang mudah diserap secara oral (HIA-),
- Tidak dapat melewati penghalang darah-otak (BBB-),
- Namun bukan substrat dari *P-glycoprotein* (PGP-), artinya tidak aktif dipompa keluar dari sel.

Evaluasi toksisitas senyawa *Myricetin* dilakukan menggunakan webserver *ProTox 3.0*, yang memprediksi berbagai aspek toksikologi berbasis pembelajaran mesin dan kemiripan molekul, berdasarkan hasil radar toksisitas Gambar 9 dan 10.



**Gambar 9.** Prediksi Toksisitas Senyawa *Myricetin*  
 Sumber: ProTox 3.0, 2025



**Gambar 10.** Radar Prediksi Toksisitas Senyawa *Myricetin*  
 Sumber: ProTox 3.0, 2025

## Pembahasan

### Pengumpulan Data Sekunder

Struktur kimia *Myricetin* yang ditampilkan pada Gambar 1. Struktur tersebut menunjukkan keberadaan beberapa gugus *hidroksil* (-OH) yang memberikan kontribusi terhadap aktivitas biologis, termasuk sifat antioksidan dan antiinflamasi, yang relevan dalam penanggulangan gejala diare. *Canonical SMILES*, yang menunjukkan bahwa kode tersebut merepresentasikan struktur kimia *Myricetin* dalam bentuk linier yang digunakan untuk analisis selanjutnya di platform *SwissADME* dan *ProTox 3.0*. *Canonical SMILES* berfungsi sebagai identitas digital unik dari molekul yang memungkinkan kompatibilitas dan ketepatan dalam berbagai sistem bioinformatika. Informasi ini menjadi fondasi untuk menganalisis parameter fisikokimia, farmakokinetik, dan toksikologi pada tahapan berikutnya dalam studi ini. Dalam konteks analisis bioinformatika, kode *Canonical SMILES* digunakan sebagai identifikasi molekuler yang mendasari seluruh proses analisis *in silico*. Selain itu, prediksi aktivitas biologis melalui *PASS Online* memberikan hasil bahwa senyawa ini memiliki potensi farmakologis, khususnya pada aktivitas antimikroba dan antiinflamasi dengan nilai  $P_a > 0,3$ , yang menjadi dasar kelayakan awal pengembangan sebagai terapi antidiare. Target molekuler senyawa *Myricetin* diprediksi menggunakan *SwissTargetPrediction*, yang mengidentifikasi protein LIM domain kinase 2 sebagai target utama, pada Gambar 6. menunjukkan interaksi *Myricetin* dengan residu-residu aktif dari protein target. Visualisasi memperlihatkan adanya ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik yang menandakan afinitas yang baik. Ini memperkuat dugaan bahwa *Myricetin* dapat menghambat aktivitas protein target yang terlibat dalam respon inflamasi pada diare. Model 3D dari protein ini dibangun melalui *Swiss-Model* dan divalidasi menggunakan *Ramachandran plot* yang menunjukkan hanya 1,6% residu berada di area yang tidak diperbolehkan. Hal ini mengindikasikan bahwa struktur model protein tersebut layak digunakan untuk simulasi interaksi *ligan*-protein.

### Studi Fisikokimia dan Farmakokinetik

Studi bioinformatika lanjutan terhadap senyawa *Myricetin* dilakukan dengan menggunakan webserver *SwissADME* untuk mengevaluasi sifat fisikokimia, farmakokinetik, dan kesesuaian sebagai kandidat obat. Informasi yang diperoleh menunjukkan bahwa *Myricetin* memiliki berat molekul 318.24 g/mol, yang masih berada dalam batas optimal untuk penetrasi membran biologis (<500 g/mol). Namun, nilai TPSA (*Topological Polar Surface Area*) mencapai 151.59 Å<sup>2</sup>, yang melebihi ambang

batas ideal TPSA  $\leq 140 \text{ \AA}^2$  untuk absorpsi usus dan permeabilitas otak, sebagaimana disebutkan oleh Daina dan Zoete (2016). Dari aspek lipofilisitas, nilai log P (iLOGP) *Myricetin* adalah 1.08, dan nilai log P lainnya seperti XLOGP3 (1.18), WLOGP (1.69), serta MLOGP (1.02) juga menunjukkan bahwa senyawa ini memiliki kemampuan moderat untuk larut dalam lemak, yang penting dalam melewati membran lipid sel. Dalam radar bioavailabilitas pada Gambar 10, diketahui bahwa senyawa *Myricetin* melampaui batas polaritas (TPSA tinggi) serta memiliki jumlah donor ikatan hidrogen (6) yang sedikit melebihi batas Lipinski (maksimal 5), sehingga memberikan 1 pelanggaran terhadap aturan Lipinski. Meski demikian, senyawa ini tetap dapat dianggap memiliki kelayakan sebagai obat karena memenuhi kriteria lainnya, termasuk bioavailability score sebesar 0.55, yang tergolong sedang. Dari segi farmakokinetik, senyawa *Myricetin* memiliki absorpsi *gastrointestinal* (GI) yang rendah dan tidak dapat melewati penghalang darah ke-otak (BBB). Hal ini menunjukkan bahwa bioavailabilitas oralnya mungkin terbatas dan formulasi khusus mungkin diperlukan untuk memastikan efektivitas terapeutiknya. Senyawa ini juga bukan substrat P-glycoprotein (P-gp), yang berarti tidak mudah dikeluarkan dari sel oleh mekanisme efflux transporter, sehingga dapat meningkatkan waktu tinggal senyawa dalam tubuh.

Hasil prediksi enzim metabolisme menunjukkan bahwa *Myricetin* menghambat enzim CYP1A2 dan CYP3A4, yang merupakan bagian dari keluarga enzim sitokrom P450 yang terlibat dalam metabolisme obat. Ini mengindikasikan adanya potensi interaksi obat yang perlu diperhatikan, terutama dalam penggunaan kombinasi dengan obat lain yang dimetabolisme oleh enzim yang sama. Secara menyeluruh, senyawa *Myricetin* menunjukkan profil yang cukup menjanjikan sebagai kandidat obat, khususnya untuk pengobatan non-sentral (bukan sistem saraf pusat). Namun, TPSA tinggi dan absorpsi oral rendah menunjukkan perlunya pengembangan formulasi lanjutan atau rute pemberian alternatif untuk mengoptimalkan efektivitasnya dalam terapi diare.

### Visualisasi penyerapan dan penetrasi BBB dengan BOILED-Egg

Untuk memperkuat prediksi farmakokinetik, dilakukan analisis menggunakan fitur BOILED-Egg pada SwissADME, yang memetakan senyawa berdasarkan nilai WLOGP (lipofilisitas) dan TPSA (polaritas) ke dalam dua area utama: putih (white) dan kuning (yolk). Area putih merepresentasikan molekul yang diprediksi memiliki penyerapan *gastrointestinal* yang baik (HIA+), sedangkan area kuning menunjukkan molekul yang berpotensi menembus penghalang darah-otak (BBB+). Berdasarkan gambar BOILED-Egg yang di dapatkan pada senyawa *Myricetin* (Gambar 3), ditampikan sebagai titik merah (PGP-) yang berada di luar kedua area tersebut, yang menandakan:

- *Myricetin* tidak termasuk senyawa yang mudah diserap secara oral (HIA-),
- Tidak dapat melewati penghalang darah-otak (BBB-),
- Namun bukan substrat dari P-glycoprotein (PGP-), artinya tidak aktif dipompa keluar dari sel.

Interpretasi dari posisi ini menunjukkan bahwa meskipun *Myricetin* memiliki potensi bioaktivitas biologis, ketersediaannya secara oral rendah dan kemampuannya menembus sistem saraf pusat terbatas. Oleh karena itu, formulasi farmasetika khusus atau sistem penghantaran obat (drug delivery system) kemungkinan besar diperlukan untuk memaksimalkan efektivitas terapeutiknya. Dengan begitu, secara keseluruhan, meskipun *Myricetin* memiliki parameter fisikokimia yang cukup baik dan potensi aktivitas biologis, tantangan utama terletak pada keterbatasan absorpsi dan distribusinya dalam tubuh. Ini menjadi penting untuk diperhatikan dalam rancang bangun sediaan obat jika senyawa ini akan dikembangkan sebagai terapi diare.

### Studi Toksikologi

Evaluasi toksisitas senyawa *Myricetin* dilakukan menggunakan webserver ProTox 3.0, yang memprediksi berbagai aspek toksikologi berbasis pembelajaran mesin dan kemiripan molekul. Berdasarkan hasil radar toksisitas (Gambar 4), dapat dilihat bahwa *Myricetin* menunjukkan aktivitas pada beberapa parameter toksikologi yang penting. Salah satu indikator penting yaitu LD50 (lethal dose 50%) yang ditampilkan dalam kategori warna kuning dan termasuk dalam kelas toksisitas 3, yang mengindikasikan bahwa *Myricetin* bersifat toksik jika tertelan dalam jumlah besar, dengan prediksi nilai LD50 berada antara 159 mg/kg. Menurut standar klasifikasi toksisitas dari OECD, kelas ini menandakan bahwa senyawa memiliki toksisitas sedang dan harus ditangani dengan kehati-hatian,

terutama dalam pengembangan obat oral. Dari grafik juga terlihat bahwa senyawa ini menunjukkan aktivitas positif (biru) terhadap beberapa endpoint toksikologi berikut:

- Hepatotoksisitas yaitu berpotensi menyebabkan kerusakan hati,
- Neurotoksisitas dan nephrotoksisitas yaitu kemungkinan memberikan efek pada sistem saraf dan ginjal,
- Nutritional toxicity menunjukkan bahwa senyawa tersebut dapat memengaruhi metabolisme nutrisi atau menyebabkan ketidakseimbangan bila dikonsumsi bersama makanan,
- Clinical toxicity menunjukkan jika potensi efek toksik dalam konteks klinis,
- CYP1A2 dan CYP2C9, menampilkan bahwa *Myricetin* dapat menghambat aktivitas enzim metabolisme utama, yang berimplikasi pada interaksi dengan obat lain yang dimetabolisme oleh enzim ini.

Namun demikian, beberapa endpoint lain seperti mutagenisitas, karsinogenisitas, dan immunotoksisitas menunjukkan nilai aktivitas yang rendah, yang merupakan sinyal positif dalam konteks pengembangan senyawa sebagai kandidat obat. Secara keseluruhan, meskipun *Myricetin* memiliki beberapa potensi toksik, terutama pada sistem hati dan metabolisme, namun risiko tersebut dapat dikendalikan melalui penyesuaian dosis dan pemantauan ketat didalam uji pra-klinis lanjutan. Data ini menunjukkan bahwa senyawa tersebut masih memiliki peluang sebagai agen terapi, termasuk dalam penanganan diare, namun perlu pengujian eksperimental lebih lanjut untuk memastikan keamanan dan efektivitas jangka panjangnya. Namun demikian, dari sisi keamanan genetik, senyawa ini menunjukkan nilai prediksi yang rendah pada mutagenisitas, karsinogenisitas, dan immunotoksisitas, yang merupakan indikator positif bagi kelayakan pengembangan obat, karena tidak menunjukkan potensi menyebabkan mutasi genetik, kanker, maupun gangguan sistem imun. Secara keseluruhan, meskipun terdapat sejumlah risiko toksikologis terutama pada sistem hati dan metabolisme, data *in silico* menunjukkan bahwa risiko tersebut masih dalam batas yang dapat dikendalikan, khususnya melalui pengaturan dosis dan pengawasan selama pengembangan pra-klinis. Oleh karena itu, *Myricetin* tetap memiliki peluang yang menjanjikan sebagai agen terapi diare, namun perlu didukung oleh validasi eksperimental secara *in vitro* maupun *in vivo* untuk memastikan keamanan penggunaan jangka panjang.

## PENUTUP

Analisis bioinformatika menunjukkan bahwa *Myricetin* dari *Psidium guajava* memiliki potensi sebagai terapi herbal untuk diare. Senyawa ini stabil dan memenuhi beberapa parameter kelayakan obat, tetapi nilai TPSA yang tinggi dan rendahnya absorpsi gastrointestinal membatasi bioavailabilitas oralnya. Dari aspek keamanan, *Myricetin* termasuk kategori toksisitas sedang, meskipun tidak menunjukkan potensi mutagenik maupun karsinogenik. Temuan ini menegaskan bahwa *Myricetin* layak dipertimbangkan sebagai kandidat terapi, meski efektivitas dan keamanannya masih perlu dibuktikan melalui studi lanjutan. Berdasarkan hasil tersebut, penelitian ini menyarankan agar pengembangan *Myricetin* difokuskan pada formulasi yang dapat meningkatkan bioavailabilitas, serta dilakukan uji *in vitro* dan *in vivo* untuk memvalidasi temuan prediktif ini. Saran ini ditujukan kepada peneliti dan pengembang obat herbal agar *Myricetin* dapat dimanfaatkan secara optimal sebagai alternatif terapi diare berbasis bahan alam.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis menyampaikan rasa terima kasih untuk dosen pengampu, laboran, dan semua pihak yang telah membantu penulis dalam pelaksanaan praktikum Bioinformatika di FMIPA UNINDRA

## DAFTAR PUSTAKA

Agraharam, G., Girigoswami, A., & Girigoswami, K. (2022). *Myricetin*: a Multifunctional Flavonol in Biomedicine. In *Current Pharmacology Reports* (Vol. 8, Issue 1, pp. 48–61). Springer Science and Business Media Deutschland GmbH. <https://doi.org/10.1007/s40495-021-00269-2>

- Banerjee, P., Kemmler, E., & Dunkel, M. (2024). ProTox 3.0: A webserver for the prediction of toxicity of chemicals. *Nucleic Acids Research*, 52(W1), W513–W520. <https://doi.org/10.1093/nar/gkae301>
- Daina, A., & Zoete, V. (2016). A BOILED-Egg to predict gastrointestinal absorption and brain penetration of small molecules. *ChemMedChem*, 11(11), 1117–1121. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201600182>
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7, 42717. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Kareem, A. T., & Kadhim, E. J. (2024). Psidium guajava: A Review on Its Pharmacological and Phytochemical Constituents. In *Biomedical and Pharmacology Journal* (Vol. 17, Issue 2, pp. 1079–1090). Oriental Scientific Publishing Company. <https://doi.org/10.13005/bpj/2924>
- Noer, S., & Pratama, R. (2025). Analisis bioinformatika potensi obat, farmakokimia, fisikokimia, dan toksisitas senyawa Chalepin dari tanaman obat *Ruta angustifolia*. *EduBiologia*, 5(1), 34–41. <https://doi.org/10.30998/edubiologia.v5i1.27368>