

Mengungkap Potensi Senyawa Bioaktif Air Kelapa (*Cocos Nucifera*) Sebagai Obat Detoksifikasi Racun Merkuri

Baharudin Juni Hermawan, Regina Pingkan Setiadji, Aida Rohmatul Hidayah, Agus Muji Santoso*

Pendidikan Biologi, Universitas Nusantara PGRI Kediri

*Penulis korespondensi: agusmujisantoso@unpkediri.ac.id

ABSTRACT

*This study aims to reveal the potential of compounds found in coconut water (*Cocos nucifera*) as detoxifying agents against mercury toxicity. The method used was a descriptive-explorative study with the collection and identification of chemical compound data from the literature. The types of active compounds present in *Cocos nucifera* were compiled through literature review. Compound IDs, canonical SMILES, biological activities, and P_a values were analyzed *in silico* using web servers (PubChem and Way2Drug) with a P_a threshold of > 0.7 to predict potential biological activities.*

*Based on the literature search, three active chemical compounds were identified in *Cocos nucifera*: valine, tyrosine, and methionine. Valine showed activity as a superoxide dismutase inhibitor (inhibiting oxidative damage) (0.893), a glutamate uptake inhibitor (inhibiting glutamate absorption) (0.854), and a serine-pyruvate transaminase inhibitor (preventing liver damage caused by mercury exposure) (0.833). Tyrosine exhibited activity as a diiodophenylpyruvate reductase inhibitor (preventing the conversion of mercury into toxic forms) (0.928), an FMO3 substrate (producing antioxidants) (0.824), and a muramoyltetrapeptide carboxypeptidase inhibitor (inhibiting mercury entry into cells) (0.799). Finally, methionine showed activity as a pro-opiomelanocortin converting enzyme inhibitor (preventing nerve damage) (0.738), a CYP2H substrate (regulating xenobiotic substrates) (0.717), and a flavin-containing monooxygenase substrate (involved in xenobiotic metabolism) (0.787).*

These three compounds have diverse targets in the human body. The results indicate that all three compounds have high P_a scores and various potential activities, particularly in inhibiting enzymes associated with mercury poisoning. This study is expected to contribute to scientific knowledge and serve as a foundation for further research on the development of local plant-based treatments for mercury detoxification.

Key words:

Cocos nucifera, bioaktif, Merkuri.

Riwayat artikel

Diterima:16/11/2025

Diperbaiki:-

Terbit:8/5/2026

PENDAHULUAN

Penggunaan merkuri di zaman sekarang sering di berbagai bidang, baik industri listrik maupun elektronik. Selain itu, penggunaan merkuri juga dimanfaatkan di bidang pestisida dan kosmetik. Dengan adanya banyak penggunaan merkuri, masyarakat harus berhati hati dan bijak dalam pemakaiannya (Hadi, M. C. (2013). Dikarenakan jika terpapar dalam kadar yang cukup lama dan tinggi hingga masuk ke dalam tubuh dapat mengakibatkan keracunan hingga kematian. maka dari itu, perlu adanya penelitian media detoksifikasi keracunan merkuri salah satu tumbuhan yang dapat digunakan sebagai media detoksifikasi merkuri adalah air kelapa (*Cocos nucifera*).

Cocos nucifera termasuk family *arecaceae* merupakan tanaman yang dapat tumbuh di wilayah tropis dan subtropis diseluruh belahan dunia di pesisir pantai maupun daerah dataran. *Cocos nucifera* merupakan tanaman yang mempunyai berbagai aktivitas farmokologi seperti untuk penurun hipertensi, penurun dismenore, peningkat kadar Hb dalam darah (Venugopal, A., & Joseph, D. 2017). Pengobatan detoksifikasi keracunan merkuri cukup mahal dan sulit dijangkau dan perlu adanya keberlanjutan hingga benar benar pulih. maka dari itu, perlu adanya pengobatan keracunan merkuri skala lokal yang ekonomis dan alamiah.

Penelitian sebelumnya mengungkapkan bahwa *C. nucifera* L. secara efektif dapat mengurangi tingkat keparahan logam, terutama Cd dan Hg, dalam darah *Rattus norvegicus* (Rahmawati et al, 2020). Penelitian serupa juga dilaporkan oleh Mustika et al (2023) bahwa Pemberian air kelapa hijau pada tikus percobaan membantu mengurangi efek kerusakan sperma akibat paparan Cd dan Hg. Adanya penelitian lain bahwa kombinasi ekstrak daun padi dan air kelapa dapat mengurangi aktivitas oksidan dan meningkatkan morfologi dan fungsi sel ginjal setelah paparan merkuri (Santosa et al, 2023). Namun, mekanisme aktivitas kerja dalam mengungkapkan potensi senyawa kimia *Cocos nucifera* sebagai obat detoksifikasi keracunan merkuri belum terungkap secara detail dan rinci.

Oleh karena itu, penelitian ini akan mengungkap potensi senyawa kimia *Cocos nucifera* sebagai obat detoksifikasi keracunan merkuri serta informasi ilmiah dari hasil penelitian ini diharapkan mampu menambah wawasan dan dasar penelitian berikutnya tentang pengembangan potensi tanaman lokal untuk obat merkuri.

METODE

Penelitian ini dilakukan pada bulan April hingga Juli tahun 2024 di Kampus 1 Universitas Nusantara PGRI Kediri. Penelitian ini menggunakan metode penelitian deskriptif eksploratif yang bertujuan untuk mengungkap senyawa kimia *Cocos nurifera* sebagai obat detoksifikasi racun merkuri. Data berbagai jenis senyawa kimia *Cocos nucifera* di telusur pustaka dari penelitian sebelumnya. Kemudian ID senyawa dan canonical smiles diperoleh dari PubChem. Canonical smiles yang diperoleh dari PubChem dimasukkan ke Way2Durg untuk memperoleh $Pa > 0,7$ dan aktivitas senyawa. Data tentang berbagai jenis senyawa kimia *Cocos nucifera* skor potensi aktivitas dianalisis secara deskriptif.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Berdasarkan hasil telusur pustaka, ada 3 senyawa aktif utama yang terdapat pada *Cocos nucifera* yaitu valine, tyrosine dan methionine. Berdasarkan eksplorasi database PubChem, senyawa valine yang digunakan memiliki nomor identitas 6287, tyrosine memiliki nomor

identitas 6057, dan methionine memiliki nomor identitas 6137. Analisis potensi senyawa menggunakan Way2Durg dan mengambil skor Pa >0,7.

Tabel 1. Senyawa yang ditemukan pada *Cocos nucifera*

No	Nama Senyawa	ID Senyawa	Pa	Activity
1	Valine	6287	0,893	Superoxide dismutase inhibitor (penghambat kerusakan oksidatif)
			0,854	Glutamate uptake inhibitor (penghambat penyerapan glutamat)
			0,833	Serine-pyruvate transaminase inhibitor (penghambat kerusakan hati paparan merkuri.
2	Tyrosine	6057	0,824	FMO3 substrate (penghasil antioksidan)
			0,799	Muramoyltetrapeptide carboxypeptidase inhibitor (penghambat masuknya merkuri kedalam sel)
			0,750	Leucolysin inhibitor (penghambat penguraian merkuri ke bentuk lebih toksik)
			0,762	5 Hydroxytryptamine release stimulant (pengatur enzim yang terpengaruh merkuri)
			0,742	Pitrilysin inhibitor (penghambat penghancuran protein kontaminan)
			0,735	Kidney function stimulant (pengoptimal fungsi ginjal)
			0,735	Macrophage colony stimulating factor agonist (peningkat aktivitas macrophage)
			0,724	Methylumbelliferyl-acetate deacetylase inhibitor (pengukur aktivitas enzim deacetylase)
			0,720	Glycopeptide alpha-N-acetylgalactosaminidase inhibitor (penghambat aktivitas enzim GAL)
			0,738	Pro-opiomelanocortin converting enzyme inhibitor (penghambat kerusakan syaraf)
3	Methionine	6137	0,717	CYP2H substrate (pengatur substrak xenobotik)
			0,787	Flavin-containing monooxygenase substrate (metabolisme xenobotik)
			0,785	Sulfur reductase inhibitor (penghambat pengurai sulfur)
			0,781	Glucan endo-1,3-beta-D-glucosidase inhibitor (menghambat pemecahan beta glukon)
			0,774	Cystathionine beta-lyase inhibitor (penghambat pembentukan cysteine)
			0,751	Serine 3-dehydrogenase inhibitor (penghambat serin)
			0,716	O-acetylhomoserine aminocarboxypropyltransferase inhibitor (peningkatan methionine tubuh)
			0,716	S-formylglutathione hydrolase inhibitor (pengubah S-formylglutathione menjadi glutation dan formiat)
			0,711	Glutamine-tRNA ligase inhibitor (Peningkat produksi glutathion)
			0,701	Protein-S-isoprenylcysteine O-methyltransferase inhibitor (pengekrimetilasi residu cystein)

Diperoleh sejumlah potensi senyawa valine dapat berpotensi sebagai Superoxide dismutase (SOD) Inhibitor atau penghambat kerusakan oksidatif bernilai PA 0,893 (Younus, 2018). Sebagai Glutamate uptake inhibitor atau penghambat penyerapan glutamat bernilai PA 0,854 (Whitelaw & Robinson, 2013). Maupun sebagai Serine-pyruvate transaminase inhibitor atau penghambat kerusakan hati paparan merkuri bernilai PA 0,833 (Clausen *et al*, 1997).

Senyawa Tyrosine berpotensi sebagai FMO3 substrate atau penghasil antioksidan bernilai PA 0,824 (Cashman *et al*, 2000). Sebagai Muramoyltetrapeptide carboxypeptidase inhibitor atau penghambat masuknya merkuri kedalam sel bernilai PA 0,799 (Baum *et al*, 2005). Sebagai Leucolysin inhibitor atau penghambat penguraian merkuri ke bentuk lebih toksik bernilai PA 0,750 (Surmiak E *et al*, 2021). Sebagai 5 Hydroxytryptamine release stimulant atau pengatur enzim yang terpengaruh merkuri bernilai PA 0,762 (Pithadia & Jain, 2009). Sebagai Pitrilysin inhibitor atau penghambat penghancuran protein kontaminan bernilai PA 0,742 (Bozkurt *et al*, 2022). Sebagai Kidney function stimulant atau pengoptimal fungsi ginjal bernilai PA 0,735 (Choi *et al*, 2015). Sebagai Macrophage colony stimulating factor agonist atau peningkat aktivitas macrophage bernilai PA 0,735 (Kumar, 2022). Sebagai Methylumbelliferyl-acetate deacetylase inhibitor atau pengukur aktivitas enzim deacetylase bernilai PA 0,724 (Kumar, R, (2024), Sebagai Glycopeptide alpha-N-acetylgalactosaminidase inhibitor atau penghambat aktivitas enzim GAL bernilai PA 0,720 (Clark & Garman, 2009). Sebagai Pro-opiomelanocortin converting enzyme inhibitor atau penghambat kerusakan syaraf bernilai PA 0,738 (Loh YP, (1988), maupun sebagai CYP2H substrate atau pengatur substrak xenobotik bernilai PA 0,717 (Oleksiak, M *et al* .(2000).

Senyawa methionine berpotensi sebagai Flavin-containing monooxygenase substrate atau metabolisme xenobotik bernilai PA 0,787 (Cashman, 1995). Sebagai Sulfur reductase inhibitor atau penghambat pengurai sulfur bernilai PA 0,785 (Veith *et al*, 2011). Sebagai Glucan endo-1,3-beta-D-glucosidase inhibitor atau menghambat pemecahan beta glukukan bernilai PA 0,781 (Onishi *et al*, 2000). Sebagai Cystathionine beta-lyase inhibitor atau penghambat pembentukan cysteine bernilai PA 0,774 (Clausen *et al*, 1997). Sebagai Serine 3-dehydrogenase inhibitor atau penghambat serin bernilai PA 0,751 (Slaughter & Davies, 1968). Sebagai O-acetylhomoserine aminocarboxypropyltransferase inhibitor atau peningkat methionine tubuh bernilai PA 0,716 (Emu, S. (2022), Sebagai S-formylglutathione hydrolase inhibitor atau pengubah S-formylglutathione menjadi glutathion dan formiat Bernilai PA 0,716 (Xu & Sun, 2017). Sebagai Glutamine-tRNA ligase inhibitor atau Peningkat produksi glutathion bernilai PA 0,711 (Perona, (2013). Sebagai Protein-S-isoprenylcysteine O-methyltransferase inhibitor atau pengekrimetilasi residu cystein bernilai PA 0,701 (Emu, S. (2022)

SIMPULAN

Hasil penelitian menunjukkan bahwa *Cocos nucifera* berpotensi sebagai detoksifikasi racun merkuri karena memiliki tiga senyawa aktif yaitu valine, tyrosine dan methionine. Ketiga senyawa tersebut memiliki target yang beragam ketika berada didalam tubuh. Berdasarkan pada studi literature ketiga senyawa dominan tersebut berpotensi untuk dikembangkan sebagai detoksifikasi racun merkuri.

DAFTAR RUJUKAN

- Baum, E. Z., Crespo-Carbone, S. M., Foleno, B., Peng, S., Hilliard, J. J., Abbanat, D., Goldschmidt, R., & Bush, K. (2005). Identification of a dithiazoline inhibitor of Escherichia coli L,D-carboxypeptidase A. *Antimicrobial agents and chemotherapy*, 49(11), 4500–4507.

- Bozkurt, B., Nair, A. P., Misra, A., Scott, C. Z., Mahar, J. H., & Fedson, S. (2022). Neprilysin Inhibitors in Heart Failure: The Science, Mechanism of Action, Clinical Studies, and Unanswered Questions. *JACC. Basic to translational science*, 8(1), 88–105.
- Cashman, J. R. (1995). Structural and catalytic properties of the mammalian flavin-containing monooxygenase. *Chemical research in toxicology*, 8(2), 165–181.
- Cashman, J. R., Akerman, B. R., Forrest, S. M., & Treacy, E. P. (2000). Population-specific polymorphisms of the human FMO3 gene: significance for detoxication. *Drug metabolism and disposition: the biological fate of chemicals*, 28(2), 169–173.
- Choi, M. R., Kouyoumdzian, N. M., Rukavina Mikusic, N. L., Kravetz, M. C., Rosón, M. I., Rodríguez Fermepin, M., & Fernández, B. E. (2015). Renal dopaminergic system: Pathophysiological implications and clinical perspectives. *World journal of nephrology*, 4(2), 196–212.
- Clark, N. E., & Garman, S. C. (2009). The 1.9 Å structure of human α-N-acetylgalactosaminidase: The molecular basis of Schindler and Kanzaki diseases. *Journal of molecular biology*, 393(2), 435–447.
- Clausen, T., Huber, R., Messerschmidt, A., Pohlenz, H. D., & Laber, B. (1997). Slow-binding inhibition of *Escherichia coli* cystathionine β-lyase by L-aminoethoxyvinylglycine: a kinetic and X-ray study. *Biochemistry*, 36(41), 12633–12643.
- Emu, S. (2022). Pengaruh Penambahan Asam Amino Metionin dengan Dosis yang Berbeda dalam Pakan Terhadap Pertumbuhan Ikan Nila Merah. *AquaMarine (Jurnal FPIK UNIDAYAN)*, 9(2), 8-12.
- Guo, W., Tan, H. Y., Li, S., Wang, N., & Feng, Y. (2020). Glutamic-Pyruvic Transaminase 1 Facilitates Alternative Fuels for Hepatocellular Carcinoma Growth-A Small Molecule Inhibitor, Berberine. *Cancers*, 12(7), 1854.
- Hadi, M. C. (2013). Bahaya merkuri di lingkungan kita. *Jurnal Skala Husada*, 10(2), 175-183.
- Kumar, A., Taghi Khani, A., Sanchez Ortiz, A., & Swaminathan, S. (2022). GM-CSF: A Double-Edged Sword in Cancer Immunotherapy. *Frontiers in immunology*, 13, 901277.
- Kumar, R. (2024). Decennary Update on Oxidative-Rearrangement Involving 1, 2-Aryl C-C Migration Around Alkenes: Synthetic and Mechanistic Insights. *Chemistry—An Asian Journal*, e202400053.
- Lima, EBC, Sousa, CNS, Meneses, LN, Ximenes, NC, Júnior, S., Vasconcelos, GS, ... & Vasconcelos, SMM (2015). *Cocos nucifera* (L.) (Arecaceae): Tinjauan fitokimia dan farmakologis. *Jurnal Penelitian Medis dan Biologi Brasil*, 48, 953-964.
- Loh YP. The effect of pepstatin A, an inhibitor of the pro-opiomelanocortin (POMC)-converting enzyme, on POMC processing in mouse intermediate pituitary. *FEBS Lett.* 1988 Sep 26;238(1):142-6.
- Mustika, I., Tyastirin, E., & Rachmawati, Y. (2018, October). Comparative Morphology of Sperm in The Rat (*Rattus norvegicus*) Exposed to Cadmium (Cd) and Mercury (Hg) with Green Coconut Water (*Cocos nucifera* L.) as Antidote. In *International Conference on Sustainable Health Promotion* (pp. 30-34).
- Mycielska, M. E., Mohr, M. T., Schmidt, K., Drexler, K., Rümmele, P., Haferkamp, S., ... & Geissler, E. K. (2019). Potential use of gluconate in cancer therapy. *Frontiers in Oncology*, 9, 522.
- Oleksiak, M. F., Wu, S., Parker, C., Karchner, S. I., Stegeman, J. J., & Zeldin, D. C. (2000). Identification, functional characterization, and regulation of a new cytochrome P450 subfamily, the CYP2Ns. *Journal of Biological Chemistry*, 275(4), 2312-2321.
- Onishi, J., Meinz, M., Thompson, J., Curotto, J., Dreikorn, S., Rosenbach, M., Douglas, C., Abruzzo, G., Flattery, A., Kong, L., Cabello, A., Vicente, F., Pelaez, F., Diez, M. T., Martin, I., Bills, G., Giacobbe, R., Dombrowski, A., Schwartz, R., Morris, S., ... Kurtz, M. B. (2000). Discovery of novel antifungal (1,3)-β-D-glucan synthase inhibitors. *Antimicrobial agents and chemotherapy*, 44(2), 368–377.
- Perona, J. J. (2013). Glutaminyl-tRNA synthetases. In *Madame Curie Bioscience Database* [Internet]. Landes Bioscience.
- Pithadia, A. B., & Jain, S. M. (2009). 5-Hydroxytryptamine Receptor Subtypes and their Modulators with Therapeutic Potentials. *Journal of clinical medicine research*, 1(2), 72–80.
- Rachmawati, Y., Mustika, I., Tyastirin, E., WATI, R., ARIFA, A., AZZAHRA, H., ... & NINGRUM, I. (2020). Effectiveness of green coconut (*Cocos nucifera* L.) water against heavy metal levels in the blood of *rattus norvegicus*. In *Proceedings of the Built Environment, Science and Technology International Conference* (pp. 113-118).

- Santosa, B., Ariyadi, T., Bintanah, S., Fristiani, A. K. B., & Damayanti, F. N. THE COMBINATION OF IR BAGENDIT RICE LEAF WATER EXTRACT AND COCONUT WATER REDUCES OXIDANT ACTIVITY AND IMPROVES THE MORPHOLOGY AND FUNCTION OF KIDNEY CELLS AFTER MERCURY EXPOSURE.
- Slaughter, J. C., & Davies, D. D. (1968). Inhibition of 3-phosphoglycerate dehydrogenase by l-serine. *The Biochemical journal*, 109(5), 749–755.
- Sulistia, A., Sulistiarini, R., & Masruhim, M. A. (2016). Aktivitas Antidotum Air Kelapa Hijau (*Cocos nucifera* L.) terhadap Keracunan Sianida Pada Mencit (*Mus musculus* L.). *Journal of Tropical Pharmacy and Chemistry*, 3(3), 191-196.
- Surmiak E, Magiera-Mularz K, Musielak B, Muszak D, Kocik-Krol J, Kitel R, Plewka J, Holak TA, Skalniak L. PD-L1 Inhibitors: Different Classes, Activities, and Mechanisms of Action. *Int J Mol Sci*. 2021
- Veith, A., Urich, T., Seyfarth, K., Protze, J., Frazão, C., & Kletzin, A. (2011). Substrate pathways and mechanisms of inhibition in the sulfur oxygenase reductase of *acidianus ambivalens*. *Frontiers in microbiology*, 2, 37.
- Venugopal, A., & Joseph, D. (2017). *Cocos nucifera*: It's pharmacological activities. *World Journal of Pharmaceutical Sciences*, 195-200.
- Whitelaw, B. S., & Robinson, M. B. (2013). Inhibitors of glutamate dehydrogenase block sodium-dependent glutamate uptake in rat brain membranes. *Frontiers in endocrinology*, 4, 123.
- Xu, Y., & Sun, Z. (2017). Regulation of S-formylglutathione hydrolase by the anti-aging gene *klotho*. *Oncotarget*, 8(51), 88259–88275.
- Younus H. (2018). Therapeutic potentials of superoxide dismutase. *International journal of health sciences*, 12(3), 88–93.