

***DOCKING* SENYAWA FLAVONOID PADA PELEPAH
PISANG (*Musa* sp.) SEBAGAI ANTIINFLAMASI**



SKRIPSI

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
Derajat Sarjana Farmasi (S.Farm.)**

Oleh:

Assyifa Hanum Salsabila
42119009

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
2023**

PERNYATAAN PENULIS

JUDUL : *DOCKING* SENYAWA FLAVONOID PADA PELEPAH
PISANG (*Musa* sp.) SEBAGAI ANTIINFLAMASI
NAMA : ASSYIFA HANUM SALSABILA
NIM : 42119009

Saya menyatakan dan bertanggungjawab dengan sebenarnya bahwa Skripsi ini adalah karya saya sendiri kecuali cuplikan dan ringkasan yang masing-masing telah saya jelaskan sumbernya. Jika pada waktu selanjutnya ada pihak lain yang mengklaim bahwa Skripsi ini sebagai karyanya, yang disertai dengan bukti-bukti yang cukup, maka saya bersedia untuk dibatalkan gelar Sarjana Farmasi saya beserta hak dan kewajiban yang melekat pada gelar tersebut.

Bumiayu, 09 September 2023

Penulis



ASSYIFA HANUM SALSABILA

NIM. 42119009

PERSETUJUAN SKRIPSI

JUDUL : DOCKING SENYAWA FLAVONOID PADA PELEPAH
PISANG (*Musa* sp.) SEBAGAI ANTIINFLAMASI
NAMA : ASSYIFA HANUM SALSABILA
NIM : 42119009

Skripsi ini telah diperiksa dan disetujui
Bumiayu, 09 September 2023

Pembimbing I, Mengetahui,

apt. Aulia Rahman, M.Farm.
NIDN. 0616108301

Pembimbing II,

Syaiful Prayogi, M.Farm.
NIPY. 18.12.101



Ketua Program Studi,

Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si.

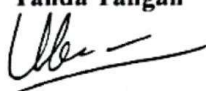
NIDN. 0626078902

PENGESAHAN SKRIPSI

DOCKING SENYAWA FLAVONOID PADA PELEPAH PISANG (*Musa sp.*) SEBAGAI ANTIINFLAMASI

ASSYIFA HANUM SALSABILA
NIM. 42119009

Skrripsi ini telah diujikan dan dipertahankan di depan Dewan Penguji pada sidang Skripsi tanggal 17 September 2023. Menurut pandangan kami, skripsi ini memadai dari segi kualitas untuk tujuan penganugrahan gelar Sarjana Farmasi (S. Farm)
Bumiayu, 18 September 2023

Nama Penguji	Tanda Tangan
1. apt. Uzun Fadli Serahli, M.Farm NIDN. 0615057902	1. 
2. Eka Trisnawati, M.Pd. NIDN. 0615068803	2. 
3. apt. Aulia Rahman, M.Farm. NIDN. 0616108301	3. 
4. Syaiful Prayogi, M.Farm. NIPY. 18.12.101	4. 

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Peradaban




Dr. apt. Pudjono, S.U
NIDN. 9990000424

Ketua Program Studi Farmasi




Luthfi Maulana Hidayat, S.KM., M.Si
NIDN. 0626078902

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

Motto:

“Ketika dengan ambisi membuat yang dikejar terasa lebih jauh maka lakukan dengan ikhlas karna itu membuat apa yang dikejar terasa lebih dekat”

Persembahan:

Yang paling utama, puji syukur kepada Allah SWT untuk taburan cinta dan kasih sayang-Mu yang telah memberikan kekuatan serta memberikan kelancaran dalam menuntut ilmu. Atas karunia serta kemudahan yang Engkau berikan akhirnya skripsi ini dapat terselesaikan. Sholawat dan salam semoga selalu terlalu terlimpahkan pada Rasulullah Muhammad SAW.

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

Orangtuaku, keluarga besarku, sahabat-sahabatku, teman-temanku dan orang tersayangku yang selalu mendukung penuh sehingga skripsi ini dapat terealisasi dengan lancar dan baik.

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
PERNYATAAN PENULIS.....	ii
PERSETUJUAN SKRIPSI.....	iii
PENGESAHAN SKRIPSI	iv
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	v
DAFTAR ISI	vi
ABSTRACT.....	viii
ABSTRAK.....	ix
KATA PENGANTAR.....	x
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR.....	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB 1 PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	4
C. Tujuan Penelitian	4
D. Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
A. Inflamasi	6
B. Tanaman Pisang (<i>Musa</i> sp.).....	11
C. Kandungan Flavonoid pada Pelepah Pisang	13
D. <i>Molecular Docking</i>	15
E. Penelitian Relevan.....	18
F. Kerangka Teori	19
G. Hipotesis	20
BAB III METODE PENELITIAN	18
A. Metode Penelitian.....	18
B. Tempat dan Waktu Penelitian.....	18
C. Variabel Penelitian	18
D. Definisi Operasional.....	19
E. Alat dan Bahan.....	19
F. Cara Kerja.....	22
G. Alur Penelitian	24
H. Analisis Hasil	24
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	25
A. Pemodelan Struktur Senyawa	25
B. Preparasi Protein Enzim	27
C. Validasi Docking.....	29
D. Hasil Docking	31
BAB V PENUTUP	24
A. Kesimpulan	24
B. Saran.....	24
DAFTAR PUSTAKA.....	40

LAMPIRAN	43
-----------------------	-----------

ABSTRACT

Docking Flavonoid Compounds in Banana Fronds (Musa sp.) as Anti-Inflammatories

Assyifa Hanum Salsabila, Aulia Rahman, Syaiful Prayogi

Email: assyifas63@gmail.com

Inflammation is one of the many diseases suffered by society and the antigen reaction from a disease can cause pain and inhibit activity. Therapy development needs to be carried out by exploring the potential of efficacious natural ingredients. Secondary metabolite compounds found in banana plant stems (Musa sp.) have anti-inflammatory activity by inhibiting the cyclooxygenase-2 (COX-2) enzyme. This research aims to determine the compounds from the midrib of banana plants (Musa sp.) which have anti-inflammatory activity through molecular docking and analyzing the anti-inflammatory activity of compounds from the midrib of banana plants (Musa sp.) on the 3LN1 enzyme. This research is an experimental qualitative study by identifying ligand-receptor complexes and the effects of combining ligands derived from plant compounds with receptors which are target proteins of inflammatory diseases using the molecular docking method. Molecular docking is carried out through several stages including compound structure modeling and optimization, 3LN1 protein preparation, docking validation, docking process, and interaction visualization. The results of the research show that the compounds from banana plant stems kaempferol-3-O-rutinoside and myricetin-3-O-rutinoside have the potential to be anti-inflammatory as indicated by MolDock Score respectively (-113.246), (-160.77) and various bonds in the form of hydrophobic and hydrogen. Conclusion: A compound that has potential as a new anti-inflammatory drug candidate that inhibits the cyclooxygenase-2 (COX-2) enzyme is myricetin-3-O-rutinoside.

Key words: Banana (Musa sp.), Flavonoids, Inflammation, Midrib, Molecular Docking, Myricetin-3-O-rutinoside.

ABSTRAK

***Docking* Senyawa Flavonoid Pada Pelepah Pisang (*Musa* sp.) Sebagai Antiinflamasi**

Assyifa Hanum Salsabila, Aulia Rahman, Syaiful Prayogi

Email: assvifas63@gmail.com

Radang atau inflamasi merupakan salah satu dari sekian banyak penyakit yang diderita oleh masyarakat dan oleh reaksi antigen dari suatu penyakit yang dapat menimbulkan nyeri dan menghambat aktivitas. Pengembangan terapi perlu dilakukan dengan eksplorasi potensi bahan alam yang berkhasiat. Senyawa metabolit sekunder yang ada pada pelepah tanaman pisang (*Musa* sp.) memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi dengan menghambat enzim *siklooksigenase-2* (COX-2). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa dari pelepah tanaman pisang (*Musa* sp.) yang memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi melalui *molecular docking* dan menganalisis bagaimana aktivitas antiinflamasi pada senyawa dari pelepah tanaman pisang (*Musa* sp.) terhadap enzim 3LN1. Penelitian ini merupakan penelitian kualitatif eksperimental dengan mengidentifikasi kompleks ligan-protein dan efek dari penyatuan ligan yang berasal dari senyawa tanaman dengan protein yang merupakan protein target dari penyakit inflamasi menggunakan metode *molecular docking*. *Molecular docking* dilakukan melalui beberapa tahap diantaranya pemodelan dan optimasi struktur senyawa, preparasi protein 3LN1, validasi *docking*, proses *docking*, dan visualisasi interaksi. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa dari pelepah tanaman pisang kaempferol-3-*O*-rutinoside dan myricetin-3-*O*-rutinoside berpotensi sebagai antiinflamasi yang ditunjukkan dengan *MolDock Score* berturut-turut (-113.246), (-160.77) dan berbagai ikatan berupa hidrofobik dan hidrogen.

Kesimpulan: senyawa yang berpotensi sebagai kandidat obat baru antiinflamasi yang menghambat enzim *siklooksigenase-2* (COX-2) adalah myricetin-3-*O*-rutinoside.

Kata kunci: Flavonoid, Inflamasi, *Molecular Docking*, Myricetin-3-*O*-rutinoside, Pelepah, Pisang (*Musa* sp.).

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “*Docking* Senyawa Flavonoid Pada Pelepah Pisang (*Musa* sp.) Sebagai Antiinflamasi”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan program Pendidikan tingkat Strata 1 (S1) pada Program Studi Farmasi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban. Penyusunan Skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Dr. Muh. Kadarisman., S.H., M.Si. selaku Rektor Universitas Peradaban.
2. Dr. apt. Pudjono, S.U selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban.
3. Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si. selaku Ketua Jurusan Farmasi Universitas Peradaban.
4. apt. Aulia Rahman, M.Farm. selaku Dosen Pembimbing 1 yang telah membimbing dan membantu dengan penuh keikhlasan dan kesabaran sehingga skripsi ini dapat dibuat dengan baik.
5. Syaiful Prayogi, M.Farm. selaku Dosen Pembimbing II yang telah membimbing dan membantu dengan penuh keikhlasan dan kesabaran sehingga skripsi ini dapat dibuat dengan baik.
6. apt. Ubun Fadli Serahli, M.Farm. selaku Dosen Penguji I yang telah memberikan saran dan masukan bagi penulis dalam penyelesaian skripsi ini.
7. Eka Trisnawati, M.Pd. selaku Dosen Penguji II yang telah memberikan saran dan masukan bagi penulis dalam penyelesaian skripsi ini.

8. Teman-teman Prodi Farmasi angkatan 2019, khususnya teman-teman Girls Room (Azkiya, Iqlima, Fransisca, Dita) yang sudah kebersamai selama 4 tahun terakhir ini serta semua pihak yang telah membantu dalam penyusunan skripsi ini yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu.
9. Teman baikku Alfiatun Nur Fitria yang telah memberikan segala dukungan dan meluangkan banyak waktu untuk menemani penulis sehingga dapat menyelesaikan skripsi ini hingga selesai.
10. Pemilik NIM 41219019 yang telah memberikan segala dukungan, perhatian, waktu, dan doa kepada penulis. Serta pemilik NIM 41219019 yang telah menemani penulis dalam menyusun skripsi ini, terima kasih atas waktu dan pengertian yang telah diberikan

Terlalu banyak orang yang berjasa kepada penulis selama penyusunan skripsi ini hanya rasa terima kasih yang dapat penulis sampaikan serta doa dan harapan semoga Allah SWT melipat gandakan pahala bagi semua. Atas perhatian dan dukungannya penulis menyampaikan terima kasih.

Bumiayu, 09 September 2023

Penulis



ASSYIFA HANUM SALSABILA
NIM. 42119009

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Penelitian Sebelumnya yang Relevan	18
Tabel 3.1 Definisi Operasional	19
Tabel 4.1 Hasil struktur senyawa flavonoid pada pelepah tanaman pisang	25
Tabel 4.2 Hasil Validasi docking ligan alami dengan protein 3LN1	29
Tabel 4.3 Interaksi ligan uji dengan protein 3LN1	32

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur 3LN1.....	11
Gambar 2.2 Pohon Pisang (<i>Musa</i> sp.).....	11
Gambar 2.3 Struktur senyawa flavonoid pelepah pisang (<i>Musa</i> sp.)	14
Gambar 2.4 Kerangka Teori.....	19
Gambar 3.1 Struktur senyawa flavonoid pelepah pisang (<i>Musa</i> sp.)	21
Gambar 3.2 Alur Penelitian.....	24
Gambar 4.1 Struktur Kristal Protein 3LN1	28
Gambar 4.2 Tampilan site docking protein 3LN1 pada <i>software Molegro</i>	28
Gambar 4.3 Interaksi ligan alami dengan protein 3LN1	30
Gambar 4.4 Interaksi senyawa uji dengan protein 3LN1	34

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Surat Izin Penelitian	43
Lampiran 2. Kartu Akses Laboratorium	44
Lampiran 3. Surat Keterangan Penelitian	45
Lampiran 4. Hasil Docking	46
Lampiran 5. Dokumentasi	49
Lampiran 6. Jadwal Penelitian	54
Lampiran 7. Biodata Penelitian	55