

**DEVI HANDAYANI**

**SKRINING FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL  
SENYAWA AKTIF AKAR KUNING (*Arcangelisia Flava* (L)  
Merr) TERHADAP RESEPTOR HCV NS5B POLYMERASE  
SEBAGAI ANTIHEPATITIS C**



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT  
2019**

**LEMBAR PENGESAHAN**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT**



**DEKAN**



**dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm**

**SKRINING FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL  
SENYAWA AKTIF AKAR KUNING (*Arcangelisia Flava* (L)  
Merr) TERHADAP RESEPTOR HCV NS5B POLYMERASE  
SEBAGAI ANTIHEPATITIS C**

**TUGAS AKHIR**


Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh  
gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi S1  
Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu  
Pengetahuan Alam, Universitas Garut

Garut, Agustus 2019

Oleh :

**Devi Handayani**  
**24041115111**

Disetujui oleh:



**Benny Permana Ph.D**

Pembimbing Utama



**Dr. Sandra Mergantara, M.Si., Apt**

Pembimbing serta



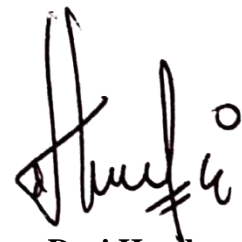
Kutipan atau saduran, baik sebagian maupun seluruh naskah ini, harus menyebutkan nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut

## DEKLARASI

Dengan ini menyatakan bahwa buku tugas akhir dengan judul “**SKRINING FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF AKAR KUNING (*Arcangelisia Flava* (L) Merr) TERHADAP RESEPTOR HCV NS5B POLYMERASE SEBAGAI ANTIHEPATITIS C**” ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri dan saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika keilmuan yang tidak berlaku dengan masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung risiko/sanksi yang dijatuhkan kepada saya apabila kemudian ditemukan adanya pelanggaran terhadap etika keilmuan dalam karya ini, atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya ini.

Garut, Agustus 2019  
Yang membuat pernyataan

Tertanda



Devi Handayani

**SKRINING FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL  
SENYAWA AKTIF AKAR KUNING (*Arcangelisia Flava* (L)  
Merr) TERHADAP RESEPTOR HCV NS5B POLYMERASE  
SEBAGAI ANTIHEPATITIS C**

DEVI HANDAYANI  
24041115111

**ABSTRAK**

Hepatitis C dapat menyebabkan sirosis hati disini hati mengalami peradangan sehingga membuat fungsi hati menjadi terganggu. Tanaman akar kuning (*Arcangelisia Flava* (L) Merr) mempunyai kandungan senyawa kimia antara lain senyawa golongan alkaloid, dan senyawa golongan flavonoid. Senyawa tersebut yaitu berberine, palmatine, jatrorrhizine, columbamine, thalifendine, dehydrocorydalmine, pycnarrhine, limacine, homoaromoline, dihydroberberine, 20hydroxycdysone, tetrandrine, fangchinoline, cepharanthine, sinoacutine, corydaline, kaempferol, quercetine, epicatechin, dan daidzein. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk memprediksi senyawa potensial yang akan menjadi kandidat obat antihepatitis C dari senyawa aktif tumbuhan akar kuning (*Arcangelisia Flava* (L) Merr) dengan menggunakan metode skrining farmakofor dan penambatan molekul. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa secara skrining farmakofor senyawa yang hit terhadap model farmakofor adalah thalipendine, Palmatine, Dehidrocoridalmine, Berberine, Columbamine, Jatrorrhizine, Quarcetine, kaempferol dengan nilai *pharmacophore fit score* berturut-turut adalah 51,29%; 51,25%; 51,24%; 51,15%; 51,15%; 51,15%; 43,12%; dan 35,63%. Hasil dari metode penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa dehidrocorydalmine memiliki nilai energi bebas -19,90 kkal/mol dan nilai konstanta inhibisi 0,0040 nM. Dari hasil tersebut dapat disimpulkan bahwa senyawa dehidrocorydalmine diprediksi memiliki potensi dan aktivitas yang paling baik sebagai antihepatitis C.

**Kata kunci :** Hepatitis C, Akar Kuning, alkaloid, flavonoid, *Ligandscout 4.4*

**SCREENING PHARMACOPHORE AND MOLECULAR  
DOCKING OF ACTIVE COMPOUNDS OF YELLOW ROOTS  
(*Arcangelisia Flava* (L) Merr) MOLECULES ON HCV NS5B  
POLYMERASE RECEPTORS AS ANTIHEPATITIS C**

DEVI HANDAYANI  
24041115111

**ABSTRACT**

*Hepatitis C can cause liver cirrhosis here the liver becomes inflamed so that it makes the liver function becomes disrupted. Yellow root plants (*Arcangelisia Flava* (L) Merr) contain chemical compounds such as alkaloid compounds and flavonoid compounds. These compounds were berberine, palmatine, jatrorrhizine, columbamine, thalifendine, dehydrocorydalmine, pycnarrhine, limacine, homoaromoline, dihydroberberine, 20hydroxycdysonone, tetrandrine, dehydrocorydalmine, pycnarrhine, limacine, homoaromoline, dihydroberberine, 20hydroxycdysonone, tetrandrine, dehydrocorydalmine, pycnarrhine, limacine, homoaromoline, dihydroberberine, 20hydroxycdysonone, tetrandrine, dehydrocorydalmine, pycnarrhine, limacine, homoaromoline, dihydroberberine. The purpose of this study was to predict potential compounds that would be candidates for antihepatitis C drugs from active compounds of yellow root plants (*Arcangelisia Flava* (L) Merr) by using pharmacophore screening methods and molecular docking. The results of this study indicate that by pharmacophore screening the compounds that hits the pharmacophore model were thalipendine, Palmatine, Dehydrocoridalmine, Berberine, Columbamine, Jatrorrhizine, Quarcetine, kaempferol with pharmacophore fit score values respectively 51.29%; 51.25%; 51.24%; 51.15%; 51.15%; 51.15%; 43.12%; and 35.63%. The results of the molecular docking method show that the dehydrocorydalmine compound has a free energy value of -19.90 kcal / mol and an inhibition constant value of 0.0040 nM. From these results it can be concluded that the dehydrocorydalmine compound is predicted to have the best potential and activity as an antihepatitis C.*

**Keywords:** *Hepatitis C, Yellow Roots, Alkaloids, Flavonoids, Ligandscout 4.4*

## KATA PENGANTAR

Assalamualaikum Wr. Wb

Alhamdulillah rabbil'alamiin, puji dan syukur Penulis panjatkan kehadirat Allah SWT, yang telah melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya sehingga Penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi dengan judul "**SKRINING FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF AKAR KUNING (*Arcangelisia Flava* (L) Merr) TERHADAP RESEPTOR HCV NS5B POLYMERASE SEBAGAI ANTIHEPATITIS C**" Dalam menyelesaikan Tugas Akhir ini, Penulis telah banyak mendapat bimbingan, bantuan, dan dukungan dari berbagai pihak, dengan ini Penulis mengucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada :

1. dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm, selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut
2. Benny Permana, Apt, Ph.D selaku pembimbing satu yang telah banyak mengarahkan dan membimbing penulis dalam membantu penelitian ini serta untuk semua saran dan masukan dalam penelitian ini.
3. Dr. Sandra Megantara. S. Si, Apt, M.Farm selaku pembimbing dua yang telah memberikan bimbingan dan arahnya dalam membantu penelitian ini serta semua saran dan motivasinya, dan mengarahkan, membimbing penulis dalam menyusun skripsi ini.
4. Farid Perdana, M.Si., Apt selaku dosen wali yang telah memberikan bimbingan dan pengarahan perkuliahan.

5. Novrianti Lubis selaku koordinaor Ta yang telah memberikan bimbingan dan pengarahan tugas akhir pada penelitian yang telah saya lakukan.
6. Dosen dan staff akademik yang telah membantu dalam proses perkuliahan dan pengarahan dalam hal informasi.
7. Ayahanda Harnu Sunggam dan Ibunda tercinta Yani Yuningsih selaku donatur utama dalam hal keuangan, do'a, dukungan, dan kasih sayang tulus yang telah diberikan kepada Penulis selama penyusunan.
8. Nenek tercinta Opon dan kedua adik tercinta Reksya Deva dan Nesa Sabela yang telah memberikan dukungan serta do'a kepada Penulis selama penyusunan.
9. Sahabat dan teman-teman dekat yang selalu memberikan dukungan, do'a, dan motivasi kepada Penulis selama penyusunan.
10. Seluruh teman-teman mahasiswa Farmasi angkatan 2015 khususnya ClassyC yang tidak dapat Penulis sebutkan satu-persatu yang senantiasa menyemangati Penulis selama penyusunan.
11. Serta pihak lain yang tidak bisa disebutkan satu persatu yang turut membantu dan terlibat dalam penyusunan Tugas Akhir ini.

Penulis sangat menyadari dalam proposal ini masih banyak kekurangan. Oleh karena itu segala saran dan kritik membangun dari penelaah sangat diharapkan demi penyempurnaan. Penulis mengharapkan semoga Allah SWT berkenan untuk selalu memberikan ilmu-Nya yang sangat bermanfaat kepada kita semua dalam berbagai hal dan ilmu pengetahuan. Semoga skripsi ini bermanfaat bagi Penulis sendiri maupun untuk kemajuan ilmu pengetahuan. Aamiin.

## DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR .....	i
DAFTAR ISI .....	iii
DAFTAR LAMPIRAN .....	vi
DAFTAR TABEL .....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	viii
PENDAHULUAN .....	1
<b>BAB</b>	
<b>1 TINJAUAN PUSTAKA .....</b>	<b>4</b>
1.1 Hepatitis .....	4
1.2 Tinjauan Botani Akar Kayu Kuning .....	7
1.3 Penambatan Molekul .....	11
1.4 Skrining Farmakofor .....	11
1.5 Ligandscout .....	12
1.6 Protein data Bank .....	12
1.7 Pubcbem.....	13
1.8 Binding Database.....	14
1.9 Dud-E.....	14
1.10 Lipinski's Rule of Five .....	14
1.11 Chemdraw Ultra.....	15
1.12 Discovery Studio.....	15

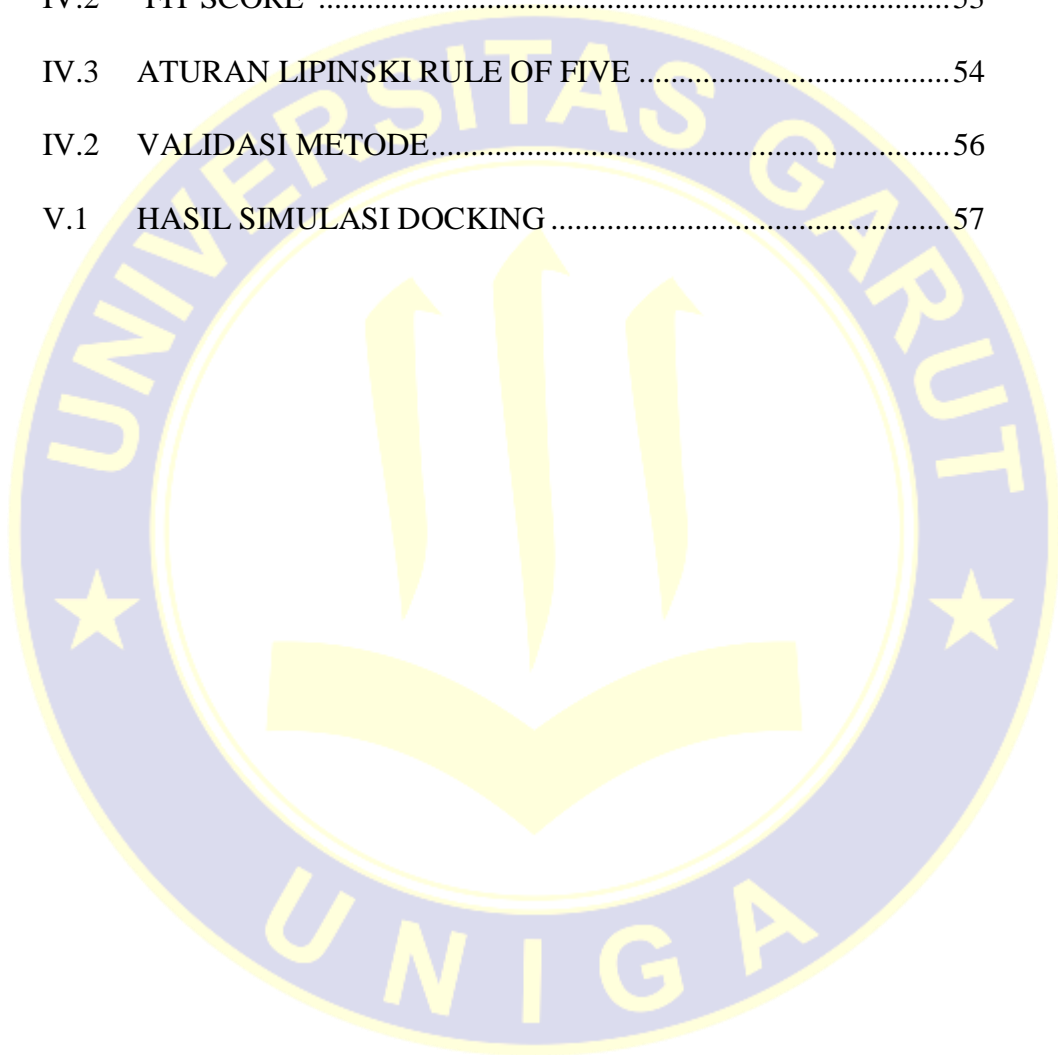
II	METODE PENELITIAN .....	16
III	ALAT DAN BAHAN .....	19
	3.1 Alat.....	19
	3.2 Bahan .....	19
IV	RENCANA PENELITIAN .....	21
	4.1 Preparasi Reseptor .....	21
	4.2 Preparasi Ligan .....	21
	4.3 Pembuatan struktur data base.....	21
	4.4 Optimasi geometri dengan Ligand scout 4.4 .....	21
	4.5 Skrining Farmakofor .....	22
	4.6 Penambatan Molekul .....	25
V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	27
VI	SIMPULAN DAN SARAN.....	35
	DAFTAR PUSTAKA .....	37

## DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN		Halaman
1	ALUR PENELITIAN.....	40
2	ALUR PENELITIAN PENAMBATAN MOLEKUL .....	41
3	SITUS PROTEIN DATA BANK .....	42
4	SITUS PUBCHEM .....	42
5	SITUS <i>LIPINSKI RULE OF FIVE</i> .....	43
6	SITUS .BINDING DATA BASE .....	43
7	SITUS DUDE.....	43
8	APLIKASI LIGAND SCOUT .....	44
9	APLIKASI BIOVIA ( Discovery studio) .....	44
10	APLIKASI CHEMDRAW ULTA .....	44
11	STRUKTUR 3D MAKROMOLEKUL PROTEIN .....	45
12	GAMBAR TUMBUHAN AKAR KUNING .....	46
13	STRUKTUR 2D SENYAWA UJI.....	47
14	SKRINING FARMAKOFOR .....	51
15	HASIL SKRINING FARMAKOFOR .....	52
16	ATURAN LIPINSKI RULE OF FIVE .....	54
17	RE-DOCKING.....	55
18	VALIDASI METODE .....	56
19	HASIL SIMULASI DOCKING.....	57
20	PENAMBATAN MOLEKUL .....	58

## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
IV.1 KURVA ROC .....	52
IV.2 FIT SCORE .....	53
IV.3 ATURAN LIPINSKI RULE OF FIVE .....	54
IV.2 VALIDASI METODE.....	56
V.1 HASIL SIMULASI DOCKING .....	57



## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
I.1 Struktur 3D Makromolekul protein.....	45
I.2 Struktur 2D Senyawa Uji.....	47
V.2 Skrining Farmakofor .....	51
V.3 Redocking .....	55
V.4 Penambatan Molekul .....	58

