

UCI SUSAN PRATIWI

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA DARI BUNGA
KENANGA (*Canangium Odorata (Lam.) Hook.f. & Thomson*)
SEBAGAI OBAT ANTIASMA**



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS GARUT
2020**

LEMBAR PENGESAHAN

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



DEKAN

dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA DARI BUNGA
KENANGA (*Canangium Odorata (Lam.) Hook.f. & Thomson*)
SEBAGAI OBAT ANTIASMA**

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, September 2020

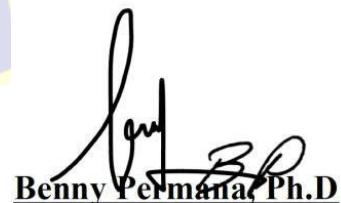
Oleh:

Uci Susan Pratiwi
2404114180

Disetujui Oleh:



Letkol Kes. Dr. Apt. Tedjo Narko, M.Si., M.Si (AP)
Pembimbing Utama



Benny Permana, Ph.D
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

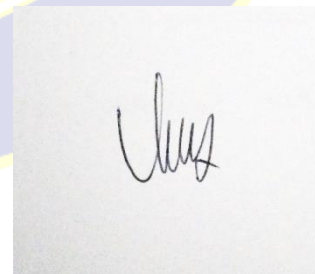
DEKLARASI

Dengan ini menyatakan bahwa buku tugas akhir yang berjudul “**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA DARI BUNGA KENANGA (*Canangium Odorata (Lam.) Hook.f. & Thomson*)** SEBAGAI OBAT **ANTIASMA**” 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 ada dalam 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, September 2020

Yang membuat pernyataan

Tertanda



UCI SUSAN PRATIWI

STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA DARI BUNGA KENANGA(*Canangium Odorata (Lam.) Hook.f. & Thomson*) SEBAGAI OBAT ANTIASMA

UCI SUSAN PRATIWI
2404114180

ABSTRAK

Asma merupakan penyakit radang kronis pada saluran pernafasan yang sering terjadi pada masyarakat diberbagai negara di seluruh dunia. Bunga kenanga (*Canangium odorata(Lam.)Hook.F.& Thomson*) merupakan salah satu tanaman yang diketahui memiliki aktivitas antiasma. Pada tanaman bunga kenanga terdapat 13 senyawa diantaranya *1-methoxy-4-methylbenzene*, *2,3-dimethoxytoluene*, *Alpha farnesene*, *Alpha copaene*, *Alpha pinene*, *Benzyl benzoate*, *Beta linalool*, *Beta myrcen*, *Beta pinene*, *Beta silenene*, *Methyl eugenol*, *Trans-beta-ocimen* dan *trans-caryophyllene*. Tujuan penelitian ini yaitu untuk memprediksi senyawa bunga kenanga (*Canangium odorata(Lam.)Hook.F.& Thomson*) yang berpotensi menjadi kandidat obat antiasma dengan metode penambatan molekul. Berdasarkan penelitian yang dilakukan pada senyawa bunga kenanga (*Canangium odorata(Lam.)Hook.F.& Thomson*) terhadap reseptor Salmeterol (6MXT) dapat disimpulkan bahwa senyawa dari bunga kenanga yaitu senyawa *Alfha copaene* memiliki afinitas berdasarkan nilai ikatan energi bebas yang lebih besar dibandingkan senyawa kimia terdapat dalam tumbuhan bunga kenanga lainnya, walaupun senyawa *Alfha copaene* tidak lebih negatif dari pembanding salbutamol tetapi senyawa *alfha copaene* telah memenuhi aturan *Lipinski's rule of Five* dan pada Uji Pre-ADME senyawa *Alfha copaene* juga memiliki penyerapan zat yang baik serta ikatan atom yang kuat dan permeabilitas yang tinggi serta pada Uji Toxtree senyawa *Alfha copaene* tidak memiliki toksisitas yang berbahaya bagi tubuh. Hasil penelitian menunjukkan senyawa *Alfha copaene* memiliki absorpsi baik dan profil permeabilitas tingkat menengah, serta memiliki profil distribusi ikatan yang kuat terhadap protein plasma sehingga dapat dijadikan sebagai kandidat obat baru antiasma.

Kata Kunci : antiasma, senyawa bunga kenanga, penambatan molekul

***STUDY OF MOLECULAR DOCKING OF COMPOUND OF
CANANGA FLOWER (Canangium Odorata (Lam.) Hook.f. &
Thomson) AS ANTI-ASTHMA***

**UCI SUSAN PRATIWI
2404114180**

ABSTRACT

Asthma is a chronic inflammatory disease of the respiratory tract that often occurs in people in various countries around the world. Cananga flower (*Canangium odorata* (Lam.) Hook.F. & Thomson) is one of the plants known to have anti-plasma activity. In the cananga flower plant there are thirteen compounds including 1-methoxy-4-methylbenzene, 2,3-dimethoxytoluene, Alpha farnesene, Alpha copaene, Alpha pinene, Benzyl benzoate, Beta linalool, Beta myrcen, Beta pinene, Beta silenene, Methyl eugenol, Trans-beta-ocimen and trans-caryophyllene. The aim of this research is to predict the compound of cananga flower (*Canangium odorata* (Lam.) Hook.F. & Thomson) which has the potential to become a candidate for anti-asthma drug with molecular docking method. Based on research conducted on the compound of cananga flower (*Canangium odorata* (Lam.) Hook.F. & Thomson) on the Salmeterol receptor (6MXT) it can be concluded that the compound from ylang flower, namely Alpha copaene compound has an affinity based on the value of free energy bonds which is greater than Chemical compounds are found in other cananga flowers, although the Alpha copaene compound is not more negative than the salbutamol comparison, the alpha copaene compound has met the Lipinski's rule of Five and in the Pre-ADME Test the Alpha copaene compound also has good substance absorption and strong atomic bonds and high permeability and in the Toxtree Test Alpha copaene compounds do not have harmful toxicity to the body. The results showed that the Alpha copaene compound had good absorption and intermediate permeability profiles, and had a strong binding distribution profile to plasma proteins so that it could be used as a candidate for new anti-asthma drugs.

Key Words : antiasthma, cananga flower compound, molecular bonding

KATA PENGANTAR

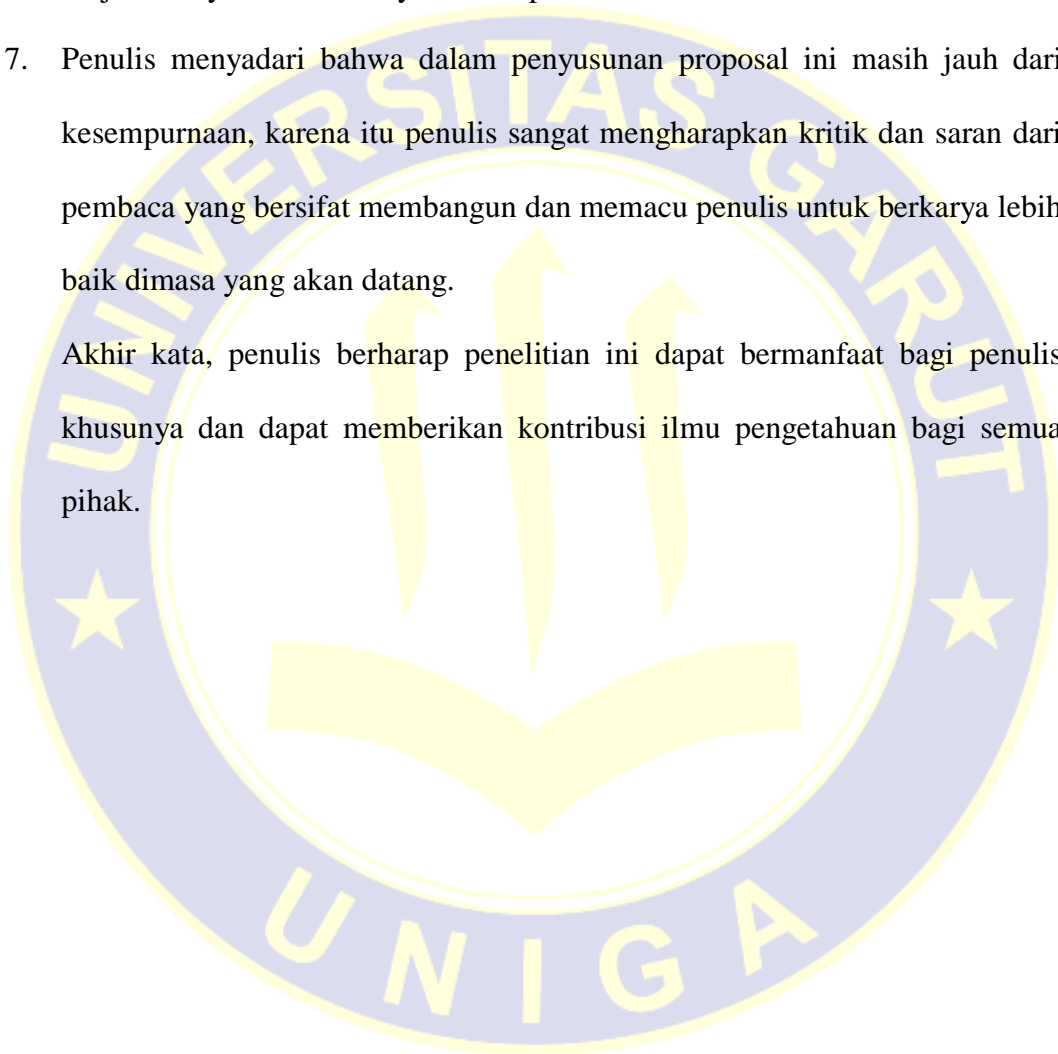
Alhamdulillah puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT, karena atas limpahan rahmat dan karunia-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan proposal penelitian yang berjudul “**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA DARI BUNGA KENANGA (*Canangium Odorata (Lam.) Hook.f. & Thomson*) SEBAGAI OBAT ANTIASMA**”. Penyusunan skripsi ini bertujuan sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.

Pada kesempatan kali ini penulis mengucapkan rasa hormat dan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Ibu dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.
2. Bapak Letkol Kes. Dr. Apt. Tedjo Narko, M.Si., M.Si (AP) selaku dosen pembimbing utama yang telah banyak memberikan bantuan, pengarahan dan meluangkan waktunya dalam penyusunan skripsi ini.
3. Bapak Benny Permana, Ph.D selaku dosen pembimbing yang telah membimbing penulis, memberikan banyak masukan, dan meluangkan waktunya dalam penyusunan skripsi ini
4. Seluruh staf pengajar dan akademik jurusan Farmasi Universitas Garut yang telah membantu penulis selama masa kuliah.

5. Orang tua tercinta, Ayahanda Erizal dan Ibunda Lasmi Hartati yang tak putus-putus memberikan doa, kasih sayang dan nasehat hingga selesainya penyusunan skripsi ini.
6. Seluruh teman-teman Farmasi angkatan 2016 atas segala bantuan dan kerjasamanya selama menyusun skripsi ini.
7. Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan proposal ini masih jauh dari kesempurnaan, karena itu penulis sangat mengharapkan kritik dan saran dari pembaca yang bersifat membangun dan memacu penulis untuk berkarya lebih baik dimasa yang akan datang.

Akhir kata, penulis berharap penelitian ini dapat bermanfaat bagi penulis khususnya dan dapat memberikan kontribusi ilmu pengetahuan bagi semua pihak.



DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR	i
DAFTAR ISI.....	iii
DAFTAR LAMPIRAN.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR	vii
BAB	
I PENDAHULUAN.....	1
II TINJAUAN PUSTAKA.....	3
2.1 Tinjauan Botani Bunga Kenanga.....	3
2.2 Asma.....	4
2.3 Reseptor.....	6
2.4 Penambatan Molekuler.....	8
2.5 Protein Data Bank.....	9
2.6 PubChem	10
2.7 Discovery Studio	11
2.8 Autodock	11
III METODE PENELITIAN.....	12
IV ALAT DAN BAHAN	13

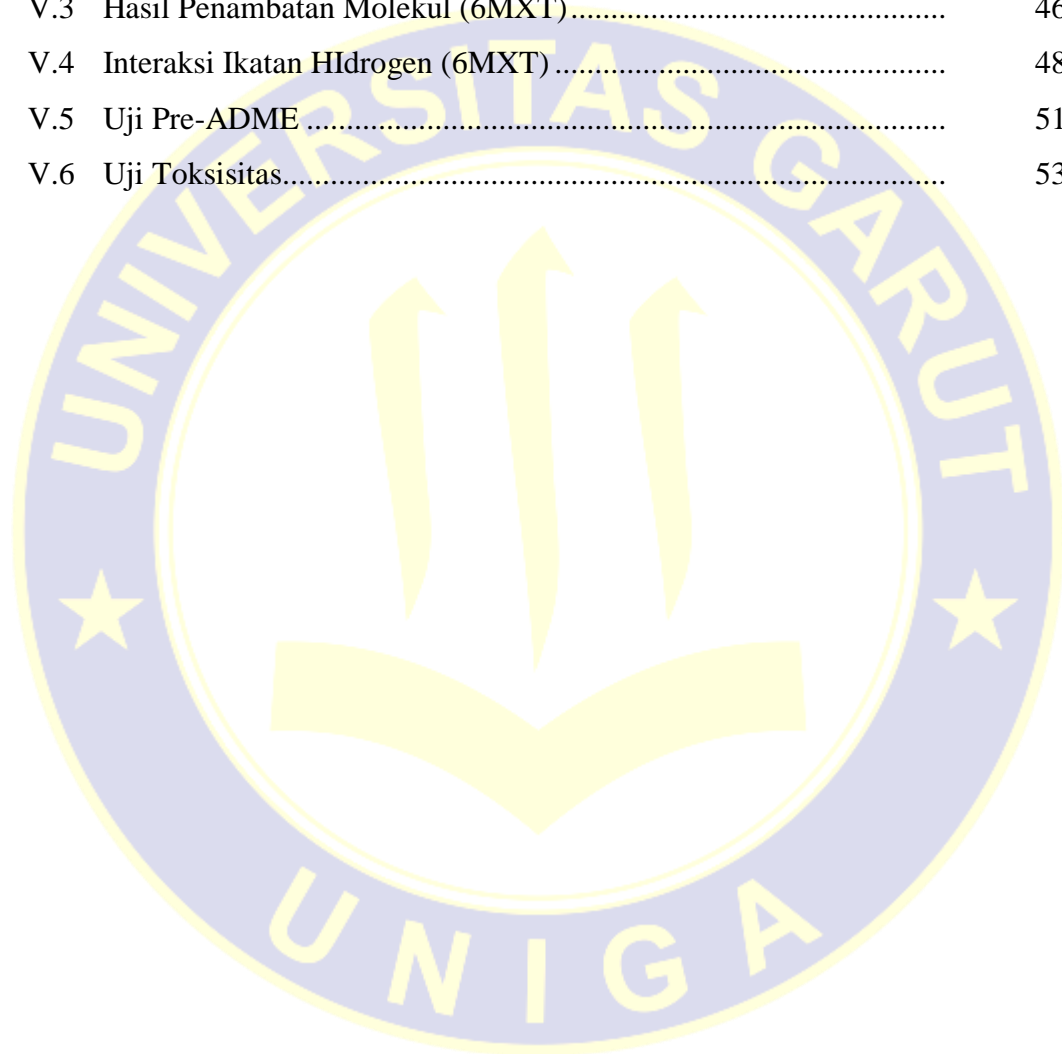
4.1 Alat.....	13
4.2 Bahan	13
V PENELITIAN	14
5.1 Preparasi Reseptor	14
5.2 Preparasi Ligan	14
5.3 Validasi Metode.....	15
5.4 Penambatan Molekul.....	15
5.5 Analisis dan Visualisasi Penambatan Molekul.....	17
5.6 Lipinski's Rule Five	17
5.7 Pengujian Pre-ADME.....	18
5.8 Pengujian Toxtree	18
5.9 Pengujian Chedraw.....	18
VI HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	19
VII SIMPULAN DAN SARAN.....	26
7.1 Simpulan.....	26
7.2 Saran	26
DAFTAR PUSTAKA	28
LAMPIRAN.....	31

DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN		Halaman
1	ALUR PENELITIAN	31
2	TANAMAN BUNGA KENANGA.....	32
3	SENYAWA BUNGA KENANGA	33
4	SITUS PROTEIN DATA BANK.....	36
5	STRUKTUR 3D RESEPTOR	37
6	LIGAN ALAMI.....	38
7	SITUS PUBCHEM	39
8	SITUS PRE-ADMET.....	40
9	PERANGKAT LUNAK DISCOVERY STUDIO.....	41
10	SITUS LIPINSKI'S RULE OF FIVE.....	42
11	PERANGKAT LUNAK AUTODOCK TOOLS	43
12	VALIDASI METODE.....	44
13	SIFAT FISIKOKIMIA 5 LIPINSKI.....	45
14	HASIL PENAMBATAN MOLEKUL	46
15	INTERAKSI IKATAN HIDROGEN DAN RESIDU ASAM AMINO	48
16	UJI PRE-ADME	51
17	UJI TOKSISITAS.....	53

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
V.1 Validasi Metode	44
V.2 Sifat Fisikokimia 5 Lipinski	45
V.3 Hasil Penambatan Molekul (6MXT)	46
V.4 Interaksi Ikatan Hidrogen (6MXT)	48
V.5 Uji Pre-ADME	51
V.6 Uji Toksisitas.....	53



DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
V.1 Alur penelitian	31
V.2 Tanaman bunga kenanga.....	32
V.3 Senyawa bunga kenanga.....	33
V.4 Situs protein data bank.....	36
V.5 Struktur 3D reseptor Salmeterol	37
V.6 Ligan alami dari reseptor 6MXT	38
V.7 Situs Pubchem.....	39
V.8 Situs pre-Admet.....	40
V.9 Program Discovery Studio Visualizer	41
V.10 Situs Lipinski's Rule Of Five.....	42
V.11 Program Autodock Tools.....	43
V.12 Visualisasi tumpang tindih 6MXT.....	44