

DEWI NASEHATUDDINIYAH

**PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF MIKROALGA
SPIRULINA (*Arthrospira plantensis*)
TERHADAP KANKER HATI**



**PROGRAM STUDI SI FARMASI
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS GARUT
2022**

LEMBAR PENGESAHAN

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

DEKAN



dr. Siva Handayani, MARS, M.Farm

PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF MIKROALGA

SPIRULINA (*Arthrospira plantesis*)

TERHADAP KANKER HATI

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, November 2022

Oleh:

Dewi Nasehatuddinayah
24041217250

Disetujui oleh:



apt. Meilia Suherman, M.Farm
Pembimbing Utama



apt. Selvira Anandia I.M, M.S.Farm.
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 “**PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF MIKROALGA SPIRULINA (*Arthrospira plantensis*) TERHADAP KANKER HATI**” ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya 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, November 2022

Yang membuat pernyataan

Tertanda



DEWI NASEHATUDDINIYAH

PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF MIKROALGA SPIRULINA (*Arthrospira plantensi*) TERHADAP KANKER HATI

DEWI NASEHATUDDINIYYAH

24041217250

ABSTRAK

Kanker merupakan suatu penyakit abnormal yang ditandai dengan pertumbuhan sel yang menyerang di berbagai bagian tubuh hingga menyebar ke organ lain. Kanker hati merupakan keganasan pada jaringan hati yang dapat berasal dari jaringan parut hati. Mikroalga *spirulina* (*Arthrospira Plantensis*) merupakan tanaman yang memiliki aktivitas sebagai antikanker hati. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui senyawa aktif dari mikroalga *spirulina* (*Arthrospira Plantensis*) yang memiliki afinitas antikanker hati dengan menggunakan metode komputasi. Hasil dari penambatan molekul menunjukkan bahwa 30 senyawa uji memiliki aktivitas sebagai antikanker hati akan tetapi tidak lebih baik dari ligan alami 3WZE. Berdasarkan aturan *Lipinski's Rule of Five*, terdapat 3 senyawa *Spirulina* yang memiliki bioavailabilitas yang baik sebagai sediaan oral. Hasil prediksi profil absorpsi dan distribusi menunjukkan bahwa semua senyawa *Spirulina* memiliki profil absorpsi dan distribusi yang baik. Hasil prediksi sifat toksisitas menunjukkan bahwa 12 senyawa *Spirulina* yang aman bagi tubuh. Berdasarkan seluruh hasil yang diperoleh disimpulkan bahwa tidak ada senyawa *Spirulina* yang potensial menjadi kandidat obat antikanker hati.

Kata Kunci: kanker hati, *spirulina*, penambatan molekul, docking

SPIRULINA (*Arthrospira plantensis*) ACTIVE COMPOUND MICROALGAE MOLECULE TEAMMENT AGAINST LIVER CANCER

DEWI NASEHATUDDINIYYAH

24041217250

ABSTRACK

Cancer is an abnormal disease characterized by the growth of cells that attack various parts of the body until it spreads to other organs. Liver cancer is a malignancy of the liver tissue which can originate from liver scarring. *Spirulina microalgae* (*Arthrospira Plantensis*) is a plant that has activity as an anticancer liver. The purpose of this study was to determine the active compound of spirulina microalgae (*Arthrospira Plantensis*) which has an anticancer liver affinity using computational methods. The results of the *molecular docking* showed that the 30 tested compounds had activity as liver anticancer but not better than the natural ligand 3WZE. Based on *Lipinski's Rule of Five*, there are 3 *Spirulina* compounds that have good bioavailability as oral preparations. The prediction results of absorption and distribution profiles show that all *Spirulina* compounds have good absorption and distribution profiles. The results of the prediction of toxicity properties show that 12 *Spirulina* compounds are safe for the body. Based on all the results obtained, it was concluded that there were no *Spirulina* compounds that could potentially be candidates for liver anticancer drugs.

Keywords: liver cancer, *spirulina*, molecular docking, docking

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah SWT yang telah melimpah rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan proposal Tugas Akhir ini yang berjudul **“PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA AKTIF MIKROALGA SPIRULINA (*Arthrospira plantensi*) TERHADAP KANKER HATI”** Proposal Tugas Akhir ini diajukan untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh Sarjana Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.

Penulis menyadari bahwa selesainya penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan berbagai pihak, baik bantuan secara moril maupun materil. Oleh karena itu, pada kesempatan ini rasa hormat serta ucapan terimakasih penulis tuturkan kepada:

1. Ibu dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Alam, Universitas Garut.
2. Ibu apt. Meilia Suherman, M.Farm, selaku pembimbing utama yang telah banyak memberikan bantuan, pengarahan serta waktu luang untuk membantu penulis.
3. Ibu apt. Selvira Anandia I.M, M.S.Farm, selaku pembimbing serta yang telah banyak memberikan bimbingan dalam penyusunan proposal ini.
4. Ibu apt. Siti Hindun, M.Farm. selaku koordinator TA yang telah memberikan bimbingan dan pengarahan selama proses pelaksanaan Tugas Akhir.

5. Bapak, Ibu Dosen, serta seluruh Staf Prodi S1 Farmasi FMIPA Universitas Garut yang telah memberikan bekal ilmu serta bimbingannya.
6. Orang tua tercinta, Ayahanda H. Usep Mubaraq dan Ibu Hj. Imas Nuraidah yang tidak pernah putus memberikan doa, kasih sayang, nasehat dan bantuan moral dan materi kepada penulis sehingga proposal Tugas Akhir ini dapat diselesaikan.
7. Eneng mulyani S.pd, Habib sopian, Lilis hermawati, Maslina munawaroh S.pd, dan abdul fatah selaku kakak-kakak terbaik yang selalu memberi dukungan, memberi suport secara moral dan materi maupun nasehat selama kuliah kepada penulis sehingga Proposal Tugas Akhir ini dapat diselesaikan.
8. Teman-teman seperjuangan kelas F dan semua mahasiswa angkatan 2017 Prodi S1 Farmasi FMIPA Universitas Garut atas segala bantuan dan kerjasamanya selama penyusunan proposal ini.
9. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu atas membantu penulis baik secara langsung maupun tidak langsung.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan skripsi ini begitu banyak kekurangan, sehingga penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun untuk penyusunan skripsi yang lebih baik lagi.

DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR	i
DAFTAR ISI	iii
DAFTAR LAMPIRAN.....	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
BAB	
I PENDAHULUAN	1
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Tinjauan Anatomi	4
2.1.1 Klasifikasi Tanaman	4
2.1.2 Morfologi Tanaman	5
2.1.3 Kandungan Kimia	5
2.1.4 Penggunaan	6
2.2 Deskripsi Penyakit	6
2.2.1 Kanker Hati	6
2.2.2 Patofisiologi	7
2.3 Reseptor	8
2.4 Kimia Komputasi	9
2.5 CADD (<i>Computer Aided Drug Design</i>)	10
2.5.1 Penambatan Molekular	10

2.5.2	Pre-ADME dan Toksisitas.....	11
2.5.3	Lipinski's Rule of Five	11
2.6	Jenis Ikatan antar Ligan dan Protein	11
2.6.1	Ikatan Hidrogen	11
2.6.2	Ikatan Ionik.....	12
2.6.3	Ikatan Kovalen.....	12
2.6.4	Ikatan Van Der Waals.....	13
2.6.5	Ikatan Dipol-dipol.....	13
2.7	Asam Amino	14
2.8	Program	15
2.8.1	Protein Data Bank	15
2.8.2	<i>Discovery Studio Visualizer</i>	15
2.8.3	<i>PubChem</i>	16
2.8.4	<i>Chemdraw 16.0</i>	16
2.8.5	<i>Autodock</i>	16
2.8.6	<i>preADMET</i>	17
III	METODE PENELITIAN	18
IV	PENELITIAN	20
4.1	Alat	20
4.1.1	Perangkat Keras (<i>Hardware</i>)	20
4.1.2	Perangkat Lunak (<i>Software</i>)	20
4.2	Bahan	20
4.3	Rancangan Penelitian	21

4.3.1	<i>Molecular Docking</i>	21
V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	24
VI	SIMPULAN DAN SARAN	31
6.1	Simpan	31
6.2	Saran	31
	DAFTAR PUSTAKA	32
	LAMPIRAN	37

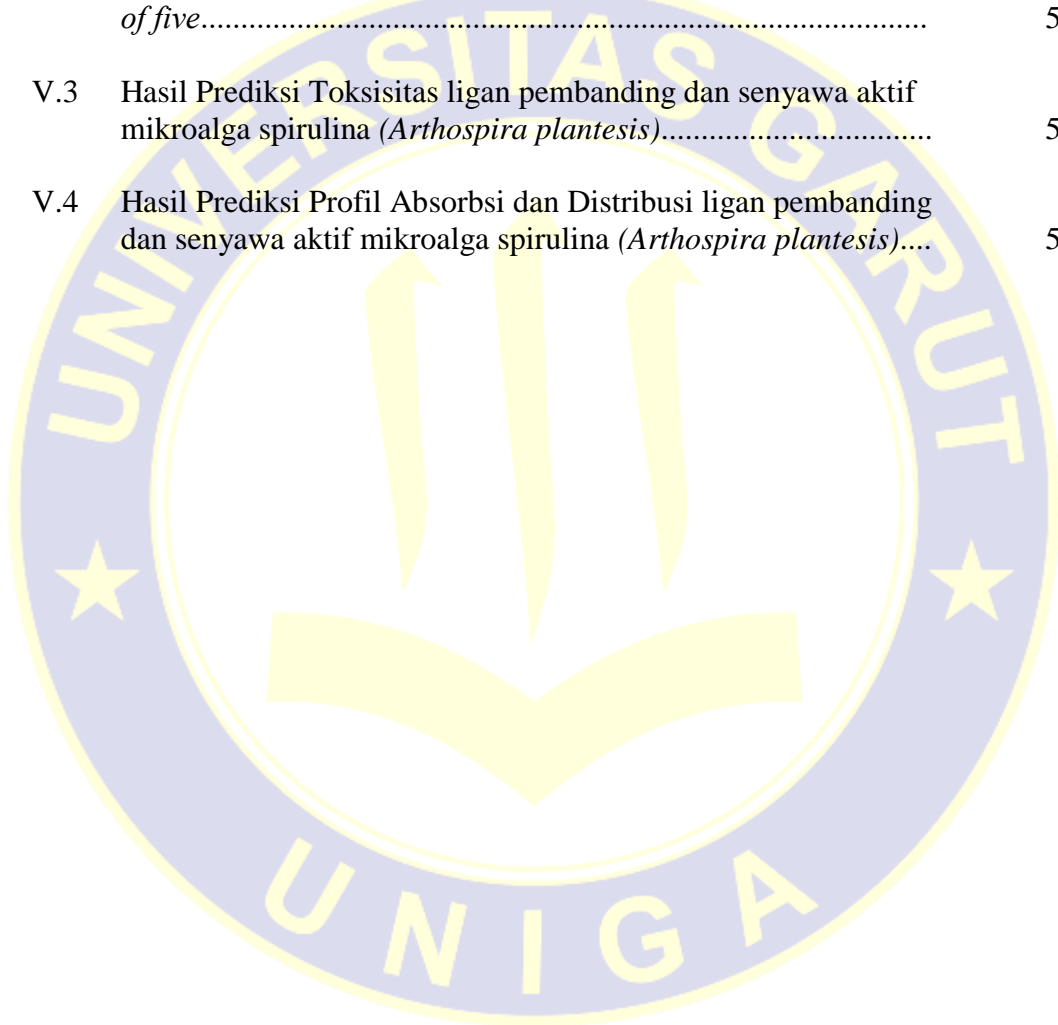


DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN		Halaman
1	ALUR PENELITIAN	37
2	SITUS DAN APLIKASI.....	40
3	MIKROALGA <i>SPIRULINA</i>	43
4	STRUKTUR SENYAWA	44
5	RESEPTOR DAN STRUKTUR LIGAN ALAMI.....	48
6	HASIL VALIDASI METODE.....	49
7	HASIL PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA UJI.....	50
8	HASIL PREDIKSI <i>DRUG LIKENESS</i>	52
9	HASIL PREDIKSI TOKSISITAS	55
10	★ HASIL PREDIKSI PROFIL ASBORBS DAN DISTRIBUSI.....★	58

DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
V.1	Hasil Penambatan ligan pada Reseptor 3WZE.....	50
V.2	Hasil Prediksi <i>Drug Likeness</i> berdasarkan aturan <i>Lipinski rule of five</i>	52
V.3	Hasil Prediksi Toksisitas ligan pembanding dan senyawa aktif mikroalga spirulina (<i>Arthospira plantesis</i>).....	55
V.4	Hasil Prediksi Profil Absorpsi dan Distribusi ligan pembanding dan senyawa aktif mikroalga spirulina (<i>Arthospira plantesis</i>)....	58



DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
II.1 Spirulina plantesis.....	4
II.2 Struktur umum asam amino.....	14
II.3 Mikroalga spirulina	43
IV.1 Alur penelitian simulasi Molecular Docking	37
IV.2 Analisis fisikokimia berdasarkan Lipinski Rule of Five	38
IV.3 Analisis pre-ADME dan toksisitas	39
IV.4 Tampilan situs protein data bank.....	40
IV.5 Tampilan situs Pubchem.....	40
IV.6 Tampilan aplikasi ChemDraw Professional 15.0	41
IV.7 Tampilan situs Pre-ADMET.....	41
IV.8 Tampilan aplikasi Toxtree	42
IV.9 Tampilan aplikasi Autodock Tools	42
V.1 Reseptor dan struktur ligan alami	48
V.2 Struktur ligan alami sorafenib 3WZE	48
V.3 Hasil validasi metode	49
V.4 Tumpang tindih ligan alami 3WZE dengan ligan hasil <i>redocking</i>	49