

**ANAS MUHAMMAD HAKIM**

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA YANG  
TERKANDUNG DI DALAM KACANG PANJANG (*Vigna  
unquiculata*) DAN KACANG HIJAU (*Vigna radiata*) SEBAGAI  
OBAT ANTIKANKER PARU**



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

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA YANG  
TERKANDUNG DI DALAM KACANG PANJANG (*Vigna  
unguiculata*) DAN KACANG HIJAU (*Vigna radiata*) SEBAGAI  
OBAT ANTIKANKER PARU**

**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, Juli 2019

Oleh:

**Anas Muhammad Hakim**  
**24041115054**

Disetujui Oleh:



**Benny Permana, Ph.D.**  
Pembimbing utama



**Riska Prasetiawati, M.Si., Apt**  
Pembimbing serta

**LEMBAR PENGESAHAN**



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



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 YANG TERKANDUNG DI DALAM KACANG PANJANG (*Vigna unguiculata*) DAN KACANG HIJAU (*Vigna radiata*) SEBAGAI OBAT ANTIKANKER PARU**” 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, Juli 2019

Yang membuat pernyataan

Tertanda



**ANAS MUHAMMAD HAKIM**

# STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA YANG TERKANDUNG DI DALAM KACANG PANJANG (*Vigna unguiculata*) DAN KACANG HIJAU (*Vigna radiata*) SEBAGAI OBAT ANTIKANKER PARU

ANAS MUHAMMAD HAKIM  
24041115054

## ABSTRAK

Kanker paru merupakan tumor ganas yang berkembang di sistem pernapasan bagian bawah, termasuk sel-sel di dinding bronkus dan bronkiolus. Ekstrak kacang panjang (*Vigna unguiculata*) dan kacang hijau (*Vigna radiata*), dua jenis tanaman yang telah teruji sesuai penelitian yang sudah diteliti bahwa kacang panjang dan kacang hijau dapat digunakan sebagai terapi kanker paru.. Tujuan penelitian ini yaitu untuk mendapatkan kandidat senyawa baru sebagai obat antikanker paru yang berasal dari ekstrak kacang panjang dan kacang hijau sehingga dapat menjadi alternatif sumber bahan baku obat melalui metode penambatan molekul pada dua reseptor kanker paru yaitu *wildtype* dan mutan dengan kode 5UGC dan 5HG7. Semua senyawa kacang panjang dan kacang hijau ditambatkan pada reseptor target menggunakan program *Autodock Tools*. Validasi metode telah dilakukan dengan nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) yang diperoleh 1,328Å dan 1,971Å. Hasil analisis penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa *osajin* memiliki nilai ikatan energi sebesar -10,28 kkal/mol pada reseptor 5UGC dan *pomiferin* memiliki nilai ikatan energi sebesar -9,09 kkal/mol pada reseptor 5HG7, nilai ikatan energi dari masing-masing senyawa lebih baik daripada obat perbandingan Gefitinib sebesar -9.05 kkal/mol pada reseptor 5UGC dan -7,00 kkal/mol pada reseptor 5HG7. Hasil pengujian profil farmakokinetika pada kedua senyawa memiliki absorpsi baik dan profil permeabilitas tingkat menengah, serta memiliki profil distribusi ikatan yang kuat terhadap protein plasma. Senyawa ini juga belum memenuhi satu aturan *Lipinski's Rule of Five* serta tidak bersifat mutagenik dan negatif karsinogenik.

**Kata Kunci** : Kanker Paru, Penambatan Molekul, Senyawa Kacang Panjang dan Kacang Hijau

**MOLECULAR DOCKING STUDY OF COMPOUND IN LONG BEAN (*Vigna unguiculata*) AND MUNG BEAN (*Vigna radiata*) AS LUNG ANTICANCER**

**ANAS MUHAMMAD HAKIM  
24041115054**

**ABSTRACT**

*Lung cancer is a malignant tumor that develops in the lower respiratory system, including cells in the bronchial wall and bronchioles. Long beans (*Vigna unguiculata*) and mung beans (*Vigna radiata*) extracts, two types of plants that have been tested according to research that have been investigated that long beans and mung beans can be used as lung cancer therapy. The purpose of this research is to find a new compound candidates as lung anticancer that derived from long bean and mung bean extracts, so that it can be an alternative source of medicinal raw materials through molecularr docking methods on two receptors namely 5UGC and 5HG7. All of the compounds of long bean and mung bean docked to target receptor using a program called Autodock Tools. The method validation has been done with the value of RMSD (Root Mean Square Deviation) which is obtained 1,328Å and 1,971Å. The results of the molecular docking analysis shows that osajin compound has an value of energy bond -10.28kkal /mol on the 5UGC receptor and pomiferin has an value of energy bond -9.09 kcal / mol on the 5HG7 receptor, the energy bond value of each compound is more better than the comparative drug Gefitinib of -9.05 kkal/mol on the 5UGC receptor and -7.00 kkal/mol on the 5HG7 receptor. The results of the pharmacokinetic profile testing in both compounds have good absorption and intermediate level permeability profiles, and have a strong distribution profile of plasma proteins. This compound also does not fulfill one of the rules of the Lipinski's Rule of Five and is not mutagenic and carcinogenic negative.*

**Key Words :** *Lung cancer, molecular docking, compounds of long bean and mung bean*

## KATA PENGANTAR

Puji serta syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas segala rahmat, karunia dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan Tugas Akhir yang berjudul **“STUDI PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA yang TERKANDUNG DI DALAM KACANG PANJANG (*Vigna unguiculata*) DAN KACANG HIJAU (*Vigna radiata*) SEBAGAI OBAT ANTIKANKER PARU”**. Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana Farmasi pada Prodi S1 Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.

Pada kesempatan ini, rasa hormat serta ucapan terimakasih penulis haturkan kepada :

1. dr. Siva Hamdani, MARS, M.Farm., selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut.
2. Benny Permana, Ph.D., selaku dosen pembimbing utama yang telah memberikan pengarahan serta bimbingan selama proses penyusunan tugas akhir ini.
3. Riska Prasetiawati, M.Si., Apt., selaku dosen pembimbing serta yang telah meluangkan waktu memberikan bimbingan, saran, dan perhatian selama proses penyusunan tugas akhir ini.
4. Keluarga yang telah memberikan doa serta dukungan secara moral dan materi selama proses penyusunan tugas akhir ini.

5. Teman-teman sesama sesama peneliti *docking* serta teman-teman angkatan 2015 yang senantiasa tiada henti memberikan kasih sayang, do'a dan nasehatnya untuk membantu selama proses penyusunan tugas akhir ini.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan skripsi ini begitu banyak kekurangan serta kesalahan. Dengan segala kerendahan hati, penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun bagi penulis dari semua pihak. Semoga amal baik semua pihak yang telah diberikan kepada penulis memperoleh kebaikan dan ridho dari Allah SWT. Aamiin.



## DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR .....	i
DAFTAR ISI.....	iii
DAFTAR LAMPIRAN.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	vii
PENDAHULUAN.....	1
<b>BAB</b>	
<b>I TINJAUAN PUSTAKA</b>	
1.1 Tinjauan Botani Kacang Panjang .....	6
1.2 Tinjauan Botani Kacang Hijau .....	7
1.3 Kanker Paru .....	9
1.4 Karsinogenesis .....	10
1.5 Reseptor.....	12
1.6 Penambatan Molekul .....	13
1.7 Lipinski's Rule of Five .....	14
1.8 Protein Data Bank .....	15
1.9 Pubchem .....	15
1.10 Discovery Studio Visualizer .....	16
1.11 Autodock Tools.....	16
1.12 Marvin Sketch.....	16

II	METODE PENELITIAN.....	17
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 Validasi Metode.....	22
	4.4 Penambatan Molekul.....	22
	4.5 Analisis dan Visualisasi Penambatan Molekul.....	24
	4.6 Pengujian Pre-ADME dan Toksisitas.....	25
V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	26
VI	KESIMPULAN DAN SARAN.....	34
	6.1 Kesimpulan.....	34
	6.2 Saran.....	34
	DAFTAR PUSTAKA.....	36
	LAMPIRAN.....	39

## DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN	Halaman
1. ALUR PENELITIAN.....	39
2. STRUKTUR 2D SENYAWA UJI.....	40
3. SITUS PROTEIN DATA BANK.....	45
4. STRUKTUR 3D RESEPTOR.....	46
5. SITUS PUBCHEM.....	47
6. SITUS PRE-ADME.....	48
7. LIGAN ALAMI.....	49
8. PERANGKAT LUNAK DISCOVERY STUDIO.....	50
9. SITUS LIPINSKI'S RULE OF FIVE.....	51
10. PERANGKAT LUNAK AUTODOCK TOOLS.....	52
11. VALIDASI METODE.....	53
12. SIFAT FISIKOKIMIA.....	54
13. HASIL PENAMBATAN MOLEKUL.....	59
14. UJI PRE-ADMET.....	81
15. UJI TOKSISITAS.....	86

## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
V.1 Validasi Metode .....	53
V.2 Sifat Fisikokimia (Kacang Panjang) .....	54
V.3 Sifat Fisikokimia (Kacang Hijau) .....	55
V.4 Hasil Penambatan Molekul (5UGC) .....	59
V.5 Hasil Penambatan Molekul (5HG7) .....	70
V.6 Uji Pre-ADMET .....	81
V.7 Uji Toksisitas .....	86



## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
V.1 Alur penelitian .....	39
V.2 Senyawa kacang panjang .....	40
V.3 Senyawa kacang hijau .....	41
V.4 Situs Protein Data Bank .....	45
V.5 Struktur 3D reseptor 5UGC .....	46
V.6 Struktur 3D reseptor 5HG7 .....	46
V.7 Situs pubchem .....	47
V.8 Situs pre-ADMET .....	48
V.9 Ligan alami 5UGC .....	49
V.10 Ligan alami 5HG7 .....	49
V.11 Program Discovery Studio Visualizer .....	50
V.12 Situs Lipinski's Rule Of Five .....	51
V.13 Program Autodock Tools .....	52
V.14 Visualisasi tumpang tindih 5UGC .....	53
V.15 Visualisasi tumpang tindih 5HG7 .....	53