

**DE ISMI ALFI MAHMUDAH**

**PERBANDINGAN NILAI KOEFISIEN PARTISI (LOG P)  
SENYAWA OBAT HASIL PREDIKSI SECARA KOMPUTASI  
DENGAN EKSPERIMENTAL**



**PROGRAM STUDI FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT  
2021**

**LEMBAR PENGESAHAN**

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



**DEKAN**

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

**PERBANDINGAN NILAI KOEFISIEN PARTISI (LOG P)  
SENYAWA OBAT HASIL PREDIKSI SECARA KOMPUTASI  
DENGAN EKSPERIMENTAL**

**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 2021

Oleh:

**De Ismi Alfi Mahmudah  
24041117015**

Disetujui Oleh:



**Dr. apt. Sandra Megantara, M.Farm**  
Pembimbing Utama



**apt. Meilia Suherman, M.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 **“PERBANDINGAN NILAI KOEFISIEN PARTISI (LOG P) SENYAWA OBAT HASIL PREDIKSI SECARA KOMPUTASI DENGAN EKSPERIMENTAL”** 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 2021

Yang Membuat Pernyataan

Tertanda



**DE ISMI ALFI MAHMUDAH**

# PERBANDINGAN NILAI KOEFISIEN PARTISI (LOG P) SENYAWA OBAT HASIL PREDIKSI SECARA KOMPUTASI DENGAN EKSPERIMENTAL

DE ISMI ALFI MAHMUDAH  
24041117015

## ABSTRAK

Lipofilisitas suatu obat merupakan salah satu parameter penting yang mempengaruhi aktivitas biologisnya. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui akurasi program perhitungan Log P yaitu (ClogP, SCFBio, miLogP, ALOGPS, MolLogP, ACDlogP, pkCSM, swissADME) lalu dibandingkan dengan nilai Log P hasil eksperimen koefisien partisi antara *n*-oktanol-air ( $\text{Log } P_{\text{exp}}$ ) hasil percobaan yang telah dilakukan di laboratorium yang diambil dari jurnal dan database. Hasil prediksi Log P hasil komputasi sebagai variabel bebas dan Log P eksperimen sebagai variabel terikat lalu data primer tersebut dianalisis secara statistik dengan program SPSS. Pada penelitian ini dapat disimpulkan aplikasi yang memiliki korelasi paling baik yaitu ACDlogP, MolLogP, ALOGPS, dengan hasil yang berturut-turut 92,8%, 92,4%, 90,7%. Hasil korelasi ini dinyatakan dengan hasil positif dan korelasi yang sempurna.

**Kata kunci:** obat, koefisien partisi, Log P, komputasi, lipofilisitas

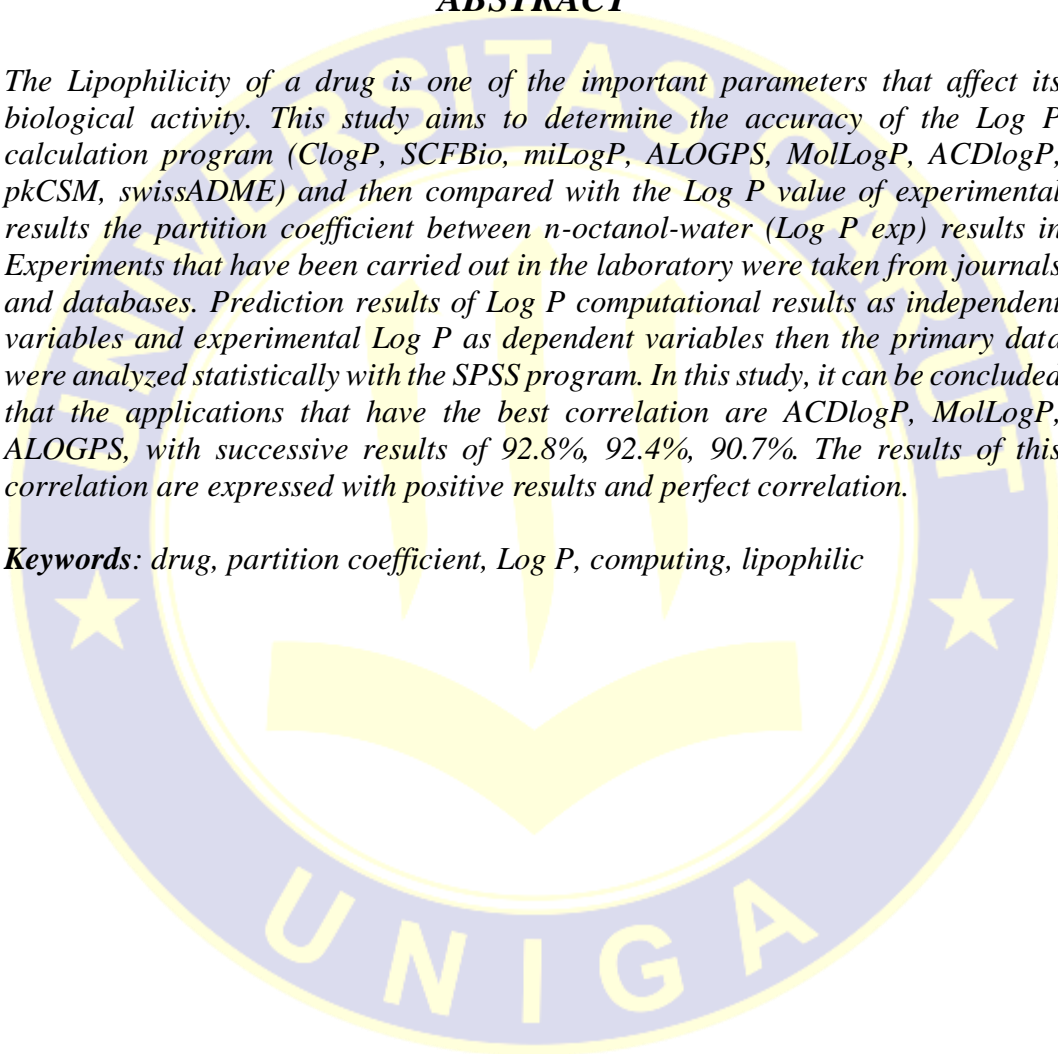
**COMPARISON OF PARTITION COEFFICIENT VALUE  
(LOG P) OF COMPUTED PRODUCTION DRUG COMPOUNDS  
WITH EXPERIMENTAL**

DE ISMI ALFI MAHMUDAH  
24041117015

**ABSTRACT**

*The Lipophilicity of a drug is one of the important parameters that affect its biological activity. This study aims to determine the accuracy of the Log P calculation program (ClogP, SCFBio, miLogP, ALOGPS, MolLogP, ACDlogP, pkCSM, swissADME) and then compared with the Log P value of experimental results the partition coefficient between n-octanol-water (Log P exp) results in Experiments that have been carried out in the laboratory were taken from journals and databases. Prediction results of Log P computational results as independent variables and experimental Log P as dependent variables then the primary data were analyzed statistically with the SPSS program. In this study, it can be concluded that the applications that have the best correlation are ACDlogP, MolLogP, ALOGPS, with successive results of 92.8%, 92.4%, 90.7%. The results of this correlation are expressed with positive results and perfect correlation.*

**Keywords:** *drug, partition coefficient, Log P, computing, lipophilic*



## KATA PENGANTAR

Puji dan syukur ke hadirat Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan buku tugas akhir dengan baik yang berjudul **“PERBANDINGAN NILAI KOEFISIEN PARTISI (LOG P) SENYAWA OBAT HASIL PREDIKSI SECARA KOMPUTASI DENGAN EKSPERIMENTAL”** Laporan Tugas Akhir ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat untuk melaksanakan Tugas Akhir II pada Program Studi S1 Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut. Penulis menyadari bahwa selesainya penyusunan laporan Tugas Akhir ini tidak terlepas dari bantuan berbagai pihak, baik bantuan secara moril maupun materil. Pada kesempatan ini, rasa hormat serta ucapan terimakasih sebesar-besarnya kepada:

1. Ibu dr. Siva Hamdani, MARS., M. Farm selaku Dekan Fakultas Matematika dan ilmu pengetahuan Alam, Universitas Garut.
2. Bapak Dr. apt. Sandra Megantara, M.Farm selaku Dosen pembimbing utama yang telah memberikan bimbingan, petunjuk dan arahan dalam penyusunan skripsi ini.
3. Ibu apt. Meilia Suherman, M.Farm., selaku Dosen pembimbing serta yang telah memberikan bimbingan dan arahan dalam penyusunan skripsi ini.
4. Ibu apt. Siti Hindun, M.Si. selaku koordinator TA yang telah memberikan pengarahan dan bimbingan tugas pada penelitian yang telah saya lakukan
5. Seluruh Dosen Pengajar di Program Studi Farmasi Universitas Garut yang telah memberikan ilmu yang bermanfaat.

6. Kedua orang tua dan keluarga besar yang senantiasa selalu memeberikan do'a dan dukungannya baik moril maupun materil.
7. Guru Pondok Pesantren Hudan Al-Islamy yang senantiasa memberikan motivasi dan do'a.
8. Sahabat di Pondok Pesantren Grup santri solehah, pesantren cuntikss, Gurfah 7, grup ghibah jajan belajar Gurfah 3 yang senantiasa memberikan dorongan dan do'a.
9. Sahabat kampus squaddskulll yang telah menemani 4 tahun ini yang selalu memberikan semangat dan do'a.
10. Rekan-rekan seperjuangan Angkatan 2017, serta teman-teman KBK Kimia Farmasi Analis yang senantiasa memberikan saran dan dukungannya.
11. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu yang telah membantu penulis baik secara langsung atau tidak langsung.

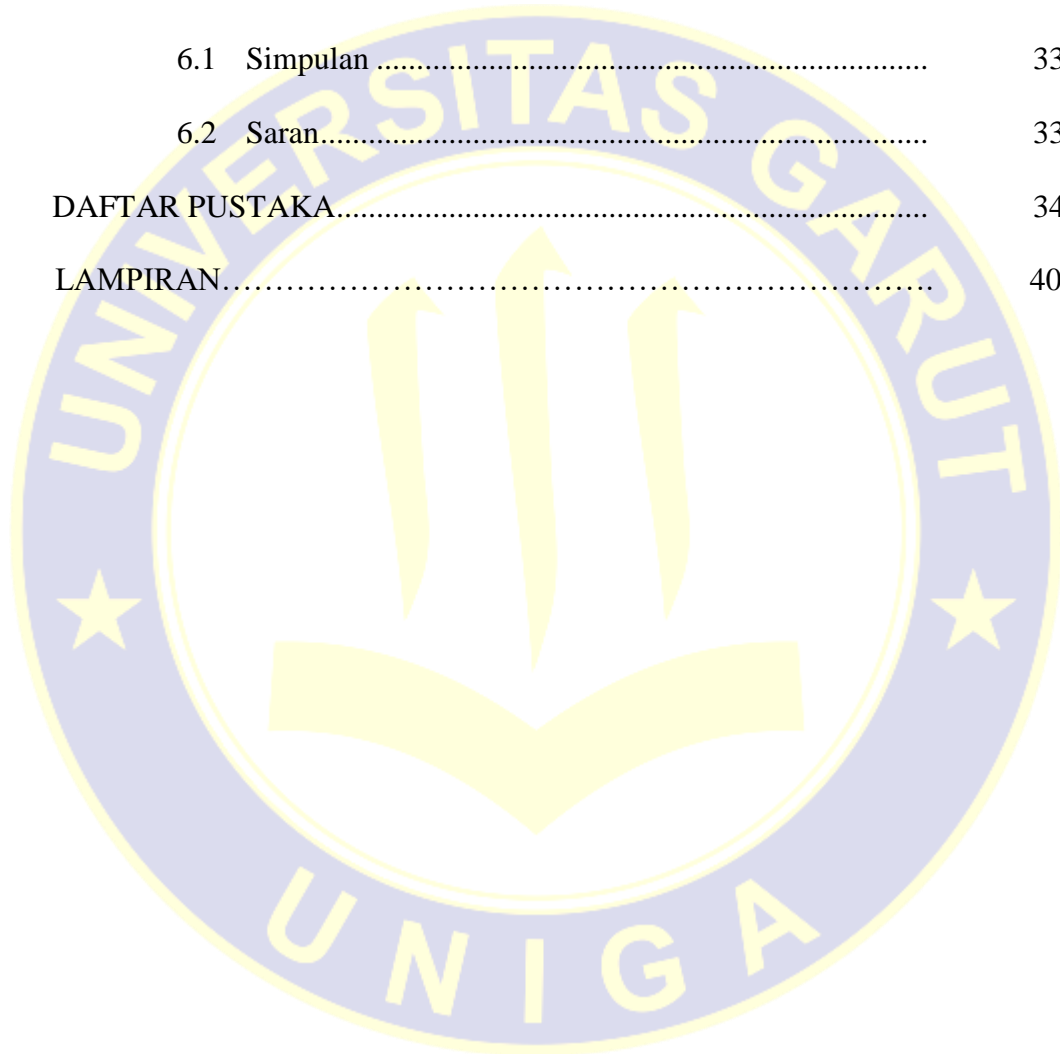
Dari penulis semoga amal ibadah dan dukungan kepada penulis dari semua pihak baik Secara langsung maupun tidak langsung semoga menajadi amal ibadah dan dibalas berlipat ganda oleh Allah SWT.

Semoga Tugas Akhir ini dapat memberikan manfaat bagi penulis dan siapapun yang berkepentingan pada karya ini dan penulis bahwa dalam penulisan proposal ini begitu banyak kekurangan, sehingga penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun laporan tugas akhir agar lebih baik lagi.

## DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR.....	i
DAFTAR ISI .....	iii
DAFTAR LAMPIRAN.....	v
DAFTAR TABEL .....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	vii
I. PENDAHULUAN .....	1
II. TINJAUAN PUSTAKA .....	3
2.1 Obat .....	3
2.2 Perjalanan Obat di dalam Tubuh.....	3
2.3 Koefisien Partisi Obat .....	5
III. METODE PENELITIAN .....	15
IV. PENELITIAN .....	17
4.1 Alat .....	17
4.2 Bahan.....	17
4.3 Prosedur Kerja.....	18
V. HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	22
5.1 Hasil korelasi CLogP dengan eksperimental .....	23
5.2 Hasil korelasi SCFBio dengan eksperimental .....	24
5.3 Hasil korelasi MiLogP dengan eksperimental .....	26
5.4 Hasil korelasi ALOGPS dengan eksperimental .....	27

5.5	Hasil korelasi MolLogP dengan eksperimental .....	28
5.6	Hasil korelasi ACDLogP dengan eksperimental.....	29
5.7	Hasil korelasi pkCSM dengan eksperimental .....	30
5.8	Hasil korelasi SwissADME dengan eksperimental.....	31
VI.	SIMPULAN DAN SARAN.....	33
6.1	Simpulan .....	33
6.2	Saran.....	33
	DAFTAR PUSTAKA.....	34
	LAMPIRAN.....	40



## DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN		Halaman
1	ALUR PENGUMPULAN DATA .....	40
2	ALUR PENENTUAN NILAI LOG P DENGAN KOMPUTASI.	41
3	SENYAWA OBAT NILAI LOG P HASIL EKSPERIMENTAL.	42
4	DAFTAR NOTASI SMILES SENYAWA OBAT .....	43
5	HASIL PREDIKSI NILAI LOG P DENGAN KOMPUTASI..	45
6	HASIL DATA STATISTIK KOEFESIEN KORELASI .....	47
7	KESIMPULAN HASIL KORELASI .....	55
8	SITUS DAN APLIKASI .....	56
9.	STRUKTUR 2D & <i>COMPOUND CID</i> SENYAWA OBAT ...	62

## DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
VII. 1	Daftar Senyawa Obat Uji Hasil Eksperimental .....	42
VII. 2	Notasi SMILES Senyawa Obat dari Pubchem .....	43
VII. 3	Data Hasil Prediksi Senyawa Obat dengan Komputasi .....	45
VII. 4	Hasil Korelasi Clogp dengan Eksperimental .....	47
VII. 5	Hasil Korelasi SCFBio dengan Eksperimental .....	48
VII. 6	Hasil Korelasi MiLogP dengan Eksperimental .....	49
VII. 7	Hasil Korelasi ALOGPS dengan Eksperimental .....	50
VII. 8	Hasil Korelasi MolLogP dengan Eksperimental .....	51
VII. 9	Hasil Korelasi ACDLogP dengan Eksperimental .....	52
VII. 10	Hasil Korelasi PkCSM dengan Eksperimental .....	53
VII. 11	Hasil Korelasi SwissADME dengan Eksperimental .....	54
VII. 12	Kesimpulan Hasil koefisien Korelasi Nilai Log P .....	55
VII. 13	Struktur 2D dan Compound <i>CID</i> Senyawa Obat .....	62

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
II. 1 Alur perjalanan obat dalam tubuh .....	4
V. 1 Grafik hubungan ClogP dengan log p eksperimental.....	23
V. 2 Grafik hubungan SCFbio dengan log p eksperimental .....	25
V. 3 Grafik hubungan MilogP dengan log p eksperimental.....	26
V. 4 Grafik hubungan ALOGPS dengan log p eksperimental.....	27
V. 5 Grafik hubungan MolLogP dengan log p eksperimental .....	28
V. 6 Grafik hubungan ACDlogP dengan log p eksperimental.....	29
V. 7 Grafik hubungan pkCSM dengan log p eksperimental .....	30
V. 8 Grafik hubungan SwissADME dengan log p eksperimental .....	31
VII.1 ★ Pengumpulan data nilai log p senyawa obat hasil eksperimental...	40
VII.2 Alur penentuan prediksi nilai log p dengan komputasi .....	41
VII.3 Tampilan situs <i>pubchem</i> .....	56
VII.4 Tampilan aplikasi <i>OSIRIS property explorer</i> .....	56
VII.5 Tampilan situs SCFbio ( <i>Lipinski rule of five</i> ) .....	57
VII.6 Tampilan situs Molinspiration.....	57
VII.7 Tampilan situs ALOGPS2.1 .....	58
VII.8 Tampilan situs MolSoft .....	58
VII.9 Tampilan aplikasi ACD/LABS.....	59
VII.10 Tampilan situs pkCSM .....	59
VII.11 Tampilan situs SwissADME .....	60

VII.12 Tampilan program SPSS .....	60
VII.13 Tampilan aplikasi ChemDraw Professional 15.0 .....	61

