



**ANALISIS *IN SILICO* SENYAWA DALAM BERBAGAI
VARIETAS BERAS (*Oryza sativa* L.) PADA RESEPTOR
ANTIOKSIDAN DENGAN METODE *DOCKING***

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

**NAMA : PUTRI NANDA LUSIANA
NPM : 17330739**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
INSTITUT SAINS DAN TEKNOLOGI NASIONAL
JAKARTA**

MARET 2020

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri, dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk telah saya nyatakan dengan benar.

NAMA : PUTRI NANDA LUSIANA
NPM : 17330739
TANGGAL : 2 MARET 2020



HALAMAN PERNYATAAN NON PLAGIAT

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Putri Nanda Lusiana

NPM : 17330739

Mahasiswa : Farmasi

Tahun Akademik : 2019/2020

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan kegiatan plagiat dalam penulisan Tugas Akhir yang berjudul “Analisis *In Silico* Senyawa Dalam Berbagai Varietas Beras (*Oryza sativa* L.) Pada Reseptor Antioksidan Dengan Metode *Docking*”

Apabila suatu saat nanti terbukti saya melakukan plagiat, maka saya akan menerima sanksi yang telah ditetapkan.

Demikian Surat Pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya.

Jakarta, 2 Maret 2020



HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :

Nama : Putri Nanda Lusiana

NPM : 17330739

Program Studi : Farmasi

Judul Skripsi : “Analisis *In Silico* Senyawa Dalam Berbagai Varietas Beras (*Oryza sativa* L.) Pada Reseptor Antioksidan Dengan Metode *Docking*”.

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains Dan Teknologi Nasional.

DEWAN PENGUJI

Pembimbing I : Desy Muliana Wenas, M.Si ()

Pembimbing II : Ritha Widyaprawati, S.Si., MARS., Apt ()

Pembimbing III : Dr. Esti Mumpuni, M.Si., Apt ()

Penguji I : Dr. Tiah Rachmatiah, M.Si., Apt ()

Penguji II : Dra. Herdini, M.Si., Apt ()

Penguji III : Saiful Bahri, M.Si ()

Ditetapkan di : Jakarta

Tanggal : 2 Maret 2020

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah Puji dan syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa atas Berkah dan Rahmat Nya sehingga penyusunan skripsi dengan judul **“Analisis *In Silico* Dalam Berbagai Varietas Beras (*Oryza sativai* L.) Pada Reseptor Antioksidan”** dapat diselesaikan. Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi Fakultas Farmasi Institut Sains dan Teknologi Nasional Jakarta.

Penulis menyadari, berhasilnya studi dan penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan berbagai pihak yang telah memberikan semangat dan doa bagi penulis. Penulis ingin mengucapkan rasa hormat dan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada **ibu Desy Muliana Wenas, M. Si., ibu Ritha Widyaprawati, MARS., Apt. dan ibu Dr. Esti Mumpuni, M. Si., Apt** selaku dosen pembimbing dengan penuh kesabaran telah membimbing, memberikan arahan, saran serta dukungan moril yang sangat berharga dalam proses penyusunan skripsi ini dari awal hingga akhir.

Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada berbagai pihak :

1. Dr. Refdanita, M.Si., Apt, selaku Dekan Fakultas Farmasi Institut Sains dan Teknologi Nasional Jakarta;
2. Jenny Pontoan, M.Farm., Apt, selaku Ketua Program Studi S1 Farmasi;
3. Saiful Bahri, M. Si, selaku Penasehat Akademik;
4. Seluruh Dosen Farmasi dan Staf Karyawan Program Studi Farmasi ISTN Jakarta;
5. Kedua orang tua, kakak serta adik dengan ketulusan cinta selalu mendoakan dan memberikan dukungan moril dan materil;
6. Teman sejawat, temanangkatan 2018 konversi Akhir kata, saya berharap Tuhan Yang Maha Esa berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga skripsi ini membawa manfaat dalam pengembangan ilmu pengetahuan terutama di bidang farmasi.

Jakarta, 2 Maret 2020

Penulis

Putri Nanda Lusiana

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS
AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai sivitas akademika Institut Sains Dan Teknologi Nasional, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Putri Nanda Lusiana
NPM : 17330739
Program Studi : S1
Farmasi Fakultas : Farmasi
Jenis karya : Skripsi

demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Institut Sains dan Teknologi Nasional **Hak Bebas Royalti Non eksklusif (*Non exclusive Royalty-Free Right*)** atas skripsi saya yang berjudul:

“Analisis *In Silico* Senyawa Dalam Berbagai Varietas Beras (*Oryza sativa* L.) Pada Reseptor Antioksidan Dengan Metode *Docking*”.

beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Non eksklusif ini Institut Sains dan Teknologi Nasional berhak menyimpan, mengalih media/format-kan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*) *softcopy* dan *hardcopy*, merawat, dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Jakarta

Pada tanggal : 2 Maret 2020

Yang menyatakan

(Putri Nanda Lusiana)

ABSTRAK

Nama : Putri Nanda Lusiana
Program Studi : S1 Farmasi
Judul : Analisis *In silico* Dalam Berbagai Varietas Beras (*Oryza sativa* L.) Pada Reseptor Antioksidan Dengan Metode *Docking*

Varietas beras memiliki potensi sebagai antioksidan dengan penangkapan radikal bebas. Penelitian ini bertujuan mendapatkan kandidat senyawa dalam varietas beras yang memiliki afinitas antioksidan dengan molekuler *docking* dan menganalisis selektivitas senyawa varietas beras dengan protein target (5FIW, 5YTO, 2F8A). Hasil penelitian menyatakan senyawa pada varietas beras dapat memiliki potensi sebagai antioksidan dalam tubuh, untuk membuktikan hal tersebut, sebagai langkah awal dapat dilakukan dengan kimia komputasi menggunakan *molecular docking*. *Software* yang digunakan untuk *molecular docking* adalah YASARA, MarvinSketch, PLANTS dan VMD. Penelitian ini menggunakan tiga macam senyawa pembanding, yaitu vitamin C, vitamin E dan kursetin. Protein target yang sudah tervalidasi berjumlah 3 reseptor dengan kode PDB 5FIW (Myeloperoksidase), 5YTO (*Superoxide Dismutase* dan 2F8A (*Glutathion peroxidase*). Berdasarkan penelitian ini telah diperoleh senyawa yang aktif terhadap masing-masing reseptor dan pembanding, yaitu Tokotrienol dan Oryzanol pada reseptor dengan kode PDB 5FIW. Proantosianidin, Tokotrienol dan Oryzanol pada reseptor dengan kode PDB 5YTO. Tokotrienol pada reseptor dengan kode PDB 2F8A dengan pembanding vitamin E.

Kata Kunci : Antioksidan, *Oryza sativa*, *Molecular docking*

ABSTRACT

Name : Putri Nanda Lusiana
Study Program : Pharmacy
Title : *In silico* Analysis in Rice Varieties (*Oryza sativa* L.) Of Anti-Oxidant Receptors on *Docking* Method

Rice varieties has potential as an antioxidant with free radicals. The research aim to get candidates for the rice varieties compound that has antioxidant affinity with molecular docking and to analyze the selectivity of the rice varieties compound with target proteins (5FIW, 5YTO, 2F8A). The result of the research that rice varieties can repair the activity of antioxidant on body, to prove this, as a first step can be done with computational chemistry using molecular docking. Software used for molecular docking is YASARA, MarvinSketch, PLANTS and VMD. This research used three different types of comparison compound, that is Vitamin C, Vitamin E and Quercetin. The validates target protein consist of 3 receptors with PDB codes 5FIW (*Myeloperoxidase*), 5YTO (*Superoxide Dismutase* dan 2F8A (*Glutathion peroxidase*). Based on this research compounds that are active have been obtained on each receptors that is *Tocotrienol* and *Oryzanol* at the receptors with PDB code 5FIW and *Proanthocyanidin*, *Tocotrienol* and *Oryzanol* at the receptors with PDB code 5YTO. *Tocotrienol* at receptor with PDB code 2F8A for comparison of vitamin E.

Keywords: Antioxidant, *Oryza sativa*, *Molecular docking*