



**STUDI IN SILICO: SENYAWA AKTIF AKAR SENGGUGU
(*Clerodendrum serratum*) TERHADAP PENGHAMBATAN
RESEPTOR HUMAN CHITOTRIOSIDASE-1 (hCHIT1)
SEBAGAI ANTIASMA**

NAMA : INTAN RIRIN SETYAWATI

NPM : 21330723

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

FEBRUARI 2023



**STUDI IN SILICO: SENYAWA AKTIF AKAR SENGGUGU
(*Clerodendrum serratum*) TERHADAP PENGHAMBATAN
RESEPTOR HUMAN CHITOTRIOSIDASE-1 (hCHIT1)
SEBAGAI ANTIASMA**

**NAMA : INTAN RIRIN SETYAWATI
NPM : 21330723**

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

FEBRUARI 2023



**STUDI IN SILICO: SENYAWA AKTIF AKAR SENGGUGU
(*Clerodendrum serratum*) TERHADAP PENGHAMBATAN
RESEPTOR HUMAN CHITOTRIOSIDASE-1 (hCHIT1)
SEBAGAI ANTIASMA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi
(S.Farm)

NAMA : INTAN RIRIN SETYAWATI

NPM : 21330723

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

FEBRUARI 2023

HALAMAN PENYATAAN ORISINALITAS

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

Nama : Intan Ririn Setyawati
NPM : 21330723
Tanggal : 28 Februari 2023



Intan Ririn Setyawati

HALAMAN PERNYATAAN NON PLAGIAT

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Intan Ririn Setyawati
NPM : 21330723
Program studi : S1 Farmasi
Tahun Akademik : Ganjil 2022-2023

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan kegiatan plagiat dalam penulisan Tugas Akhir yang berjudul “Studi *In Silico*: Senyawa Aktif Akar Senggugu (*Clerodendrum serratum*) terhadap Penghambatan Reseptor *Human chitotriosidase-1* (hCHIT1) sebagai Antiasma”.

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, 28 Februari 2023



Intan Ririn Setyawati

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :
Nama : Intan Ririn Setyawati
NPM : 21330723
Program Studi : S1 Farmasi
Judul Skripsi : Studi *In Silico*: Senyawa Aktif Akar Senggugu
(*Clerodendrum serratum*) terhadap Penghambatan
Reseptor *Human chitotriosidase-1* (hCHIT1) sebagai
Antiasma

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 : apt. Dra. Herdini, M.Si (.....)

Pembimbing : apt. Roseline Sitorus, M.Sc (.....)

Penguji : Dr. apt. Tiah Rachmatiah, M.Si (.....)

Penguji : Rosario Trijuliamos Manalu, M.Si (.....)

Penguji : Munawarohthus Sholikha, M.Si (.....)

Ditetapkan di : Jakarta

Tanggal : 28 Februari 2023

KATA PENGANTAR

Puji syukur saya panjatkan kepada Allah SWT, karena atas berkat dan rahmat-Nya, saya dapat menyelesaikan skripsi ini. Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Program Studi Farmasi pada Fakultas Farmasi Institut Sains dan Teknologi Nasional.

Penulis menyadari bahwa, tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, dari masa perkuliahan sampai pada penyusunan skripsi ini, sangatlah sulit bagi saya untuk menyelesaikan skripsi ini. Maka dengan segala kerendahan hati saya menyampaikan ucapan terima kasih terutama kepada apt. Dra. Herdini, M.Si. dan apt. Roseline Sitorus, M.Sc., selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan saya dalam penyusunan skripsi ini. Selain itu saya mengucapkan terima kasih kepada:

- a) Dekan Fakultas Farmasi Institut Sains dan Teknologi Nasional ibu Dr. apt. Refdanita, M.Si.
- b) Kepala Program Studi Farmasi Fakultas Farmasi Institut Sains dan Teknologi Nasional ibu Dr. apt. Subaryanti, M.Si.
- c) Dosen pembimbing akademik ibu apt. Siswati, S.Si, M.Farm
- d) Seluruh Dosen Prodi Farmasi, Staf Administrasi, Staf Perpustakaan Fakultas Farmasi dan Perpustakaan Pusat ISTN yang telah membantu dalam menuntut ilmu selama masa perkuliahan
- e) Orang tua dan keluarga saya yang telah memberikan bantuan dukungan material dan moral; dan
- f) Seluruh rekan mahasiswa Program Studi Farmasi yang selalu memberikan bantuan, dukungan dan motivasi kepada penulis.

Akhir kata, saya berharap Allah SWT berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi pengembangan ilmu pengetahuan.

Jakarta, Januari 2023

Penulis

**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 : Intan Ririn Setyawati

NPM : 21330723

Program Studi : S1 Farmasi

Fakultas : Farmasi

Jenis Karya : Skripsi

demikian pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Institut Sains dan Teknologi Nasional Hak Bebas Royalti Noneksklusif (*Nonexclusive Royalty- Free Right*) atas karya ilmiah Saya yang berjudul :

“Studi *In Silico*: Senyawa Aktif Akar Senggugu (*Clerodendrum serratum*)
terhadap Penghambatan Reseptor *Human Chitotriosidase-1* (hCHIT1) sebagai
Antiasma”

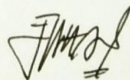
berserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Institut Sains dan Teknologi Nasional berhak menyimpan, mengalih media/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*) *soft copy* dan *hard copy*, merawat dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Jakarta

Pada Tanggal : 28 Februari 2023

Yang menyatakan



(Intan Ririn Setyawati)

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENYATAAN ORISINALITAS	ii
HALAMAN PERNYATAAN NON PLAGIAT	iii
HALAMAN PENGESAHAN	iv
KATA PENGANTAR	v
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	vi
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT.....	viii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian.....	5
1.4 Manfaat Penelitian.....	5
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Asma.....	6
2.1.1 Definisi Asma	6
2.1.2 Faktor Risiko Asma	7
2.1.3 Patofisiologi Asma.....	8
2.1.4 Terapi Asma.....	10

2.1.5	Golongan Xantin	10
2.2	Chitotriosidase (CHIT1).....	11
2.2.1	Definisi Chitotriosidase (CHIT1)	11
2.2.2	Peran Biologis CHIT1.....	12
2.3	Tanaman Senggugu	14
2.3.1	Taksonomi.....	14
2.3.2	Morfologi	14
2.3.3	Kandungan Kimia	15
2.3.4	Efek farmakologi	16
2.4	Molecular Docking.....	17
2.5	Program Komputasi.....	19
2.5.1	Protein Data Bank	19
2.5.2	YASARA	19
2.5.3	MarvinSketch	20
2.5.4	PubChem.....	21
2.5.5	PLANTS	21
2.5.6	<i>Lipinski's rule of five</i>	22
2.5.7	Discovery Studio Visualizer	22
2.5.8	PkCSM dan ProTox-II	22
BAB 3 METODE PENELITIAN		24
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	24
3.2	Prinsip Percobaan.....	24
3.3	Alat Penelitian	24
3.3.1	Perangkat Keras	24
3.3.2	Perangkat Lunak	24
3.4	Bahan Penelitian.....	24

3.4.1	Target Reseptor	24
3.4.2	Struktur Ligan	25
3.5	Tahapan Penelitian	27
3.5.1	Persiapan Struktur Protein	27
3.5.2	Preparasi Struktur Ligan	28
3.5.3	Validasi <i>Molecular Docking</i>	28
3.5.4	Analisis <i>Lipinski's rule of five</i>	28
3.5.5	<i>Molecular Docking</i> dengan PLANTS 1.1.....	28
3.5.6	Analisa dan Visualisasi <i>Docking</i>	29
3.5.7	Analisis ADMET	29
3.6	Skema Tahapan Penelitian	31
BAB 4 HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN		32
4.1	Hasil Analisis Preparasi Protein <i>human chitotriosidase</i> (hCHIT1)	32
4.2	Hasil Analisis Preparasi Ligan	34
4.3	Hasil Analisis Validasi <i>Molecular Docking</i>	34
4.4	Hasil Analisis <i>Lipinski's Rule of Five</i>	35
4.5	Hasil Analisis <i>Molecular Docking</i> dengan PLANTS 1.1	37
4.6	Hasil Analisis Visualisasi <i>Docking</i>	39
4.7	Hasil Analisis ADMET	46
4.7.1	Absorpsi	47
4.7.2	Distribusi.....	48
4.7.3	Metabolisme.....	49
4.7.4	Ekskresi.....	50
4.7.5	Toksisitas	51
4.8	Potensi antiasma dari senyawa aktif akar senggugu	53
BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN		54

5.1	Kesimpulan.....	54
5.2	Saran.....	54
DAFTAR PUSTAKA		55
LAMPIRAN.....		63

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Kandungan kimia dalam bagian tanaman <i>Clerodendrum serratum</i>	15
Tabel 2.2 Ketentuan jarak interaksi gugus fungsional ligan dengan asam amino pasangannya	18
Tabel 2.3 Tabel Kelas LD50 oral	23
Tabel 4.1 Hasil prediksi sifat fisikokimia (<i>Lipinski's rule of five</i>) senyawa aktif akar senggugu (<i>Clerodendrum serratum</i>) dengan pembanding teofilin	36
Tabel 4.2 Hasil analisis <i>molecular docking native ligand</i> , pembanding, dan ligan senyawa aktif akar senggugu	38
Tabel 4.3 Data interaksi residu asam amino pada hasil docking ligan dan protein 5NRA	44
Tabel 4.4 Hasil analisis profil absorpsi senyawa aktif akar senggugu dengan pembanding teofilin	47
Tabel 4.5 Hasil analisis profil distribusi senyawa aktif akar senggugu dengan pembanding teofilin	48
Tabel 4.6 Hasil analisis profil metabolisme senyawa aktif akar senggugu dengan pembanding teofilin	50
Tabel 4.7 Hasil analisis profil ekskresi senyawa aktif akar senggugu dengan pembanding teofilin	51
Tabel 4.8 Hasil prediksi toksisitas senyawa aktif akar senggugu (<i>Clerodendrum serratum</i>)	52

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Penyempitan jalan napas akibat serangan asma	6
Gambar 2.2 Patofisiologi asma	9
Gambar 2.3 Chitotriosidase (CHIT1) pada gangguan pernapasan.	13
Gambar 2.4 (a) Tanaman <i>Clerodendrum serratum</i> (b) bunga <i>Clerodendrum serratum</i> (c) akar <i>Clerodendrum serratum</i>	15
Gambar 2.5 Tampilan MarvinSketch 5.2.5.1	20
Gambar 2.6 Tampilan PubChem.....	21
Gambar 3.1 Reseptor <i>human chitotriosidase-1 (hCHIT)</i>	25
Gambar 4.1 Reseptor human chitotriosidase-1 (hCHIT)	33
Gambar 4.2 Protein hasil preparasi	33
Gambar 4.3 <i>Native ligand</i> hasil preparasi	33
Gambar 4.4 Hasil validasi molecular docking	35
Gambar 4.5 Validasi molecular docking <i>native ligand</i>	35
Gambar 4.6 Visualisasi docking <i>native ligand</i> dengan protein 5NRA	40
Gambar 4.7 Visualisasi docking teofilin dengan protein 5NRA	40
Gambar 4.8 Visualisasi docking apigenin-7-glucoside dengan protein 5NRA	41
Gambar 4.9 Visualisasi docking D-mannitol dengan protein 5NRA.....	41
Gambar 4.10 Visualisasi docking β -Dihidrofukosterol dengan protein 5NRA....	42
Gambar 4.11 Visualisasi docking asam ikosahidropisenat dengan protein 5NRA42	
Gambar 4.12 Visualisasi docking asam queretaroic dengan protein 5NRA.....	43
Gambar 4.13 Visualisasi docking asam serratagenik dengan protein 5NRA	43
Gambar 4.14 Visualisasi docking asam ursolat dengan protein 5NRA.....	44

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Surat penetapan dosen pembimbing dan penetapan judul tugas akhir	63
Lampiran 2 Preparasi protein pada laman PDB dan YASARA.....	64
Lampiran 3 Preparasi ligan pada aplikasi YASARA.....	68
Lampiran 4 Preparasi ligan pada Marvin Sketch	70
Lampiran 5 Proses <i>molecular docking</i> dan validasi <i>molecular docking</i>	77
Lampiran 6 Preparasi visualisasi <i>molecular docking</i>	81
Lampiran 7 Visualisasi <i>molecular docking</i>	82
Lampiran 8 Analisis sifat fisikokimia <i>Lipinski's rule of five</i> dan parameter ADMET menggunakan pkCSM.....	83
Lampiran 9 Analisis toksisitas menggunakan ProTox-II.....	87