

SKRIPSI

**STUDI IN SILICO AKTIVITAS SENYAWA TUMBUHAN
OBAT DI DALAM AL-QUR'AN DAN AL-HADITS
TERHADAP TARGET RESEPTOR GLP-1
SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2**



DISUSUN OLEH :

INDAH AMANDA WULANSARI

204820103019

PROGRAM STUDI S1-FARMASI

SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN AISYIAH

PALEMBANG

2024

SKRIPSI

**STUDI IN SILICO AKTIVITAS SENYAWA TUMBUHAN
OBAT DI DALAM AL-QUR'AN DAN AL-HADITS
TERHADAP TARGET RESEPTOR GLP-1
SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2**

**Diajukan Sebagai
Salah Satu Syarat untuk Memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi (S.Farm)**



DISUSUN OLEH :

INDAH AMANDA WULANSARI

204820103019

PROGRAM STUDI S1-FARMASI

SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN AISYIAH

PALEMBANG

2024

HALAMAN PERSETUJUAN

SKRIPSI

STUDI IN SILICO AKTIVITAS SENYAWA TUMBUHAN OBAT DI DALAM AL-QUR'AN DAN AL-HADITS TERHADAP TARGET RESEPTOR GLP-1 SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2

OLEH :

INDAH AMANDA WULANSARI

204820103019

Dosen Pembimbing

- I. Gerry Nugraha, M.Sc.,M.Farm (.....)
NIP. 2015.09.057

- II. Suprayetno, S.Si., M.T (.....)
NIP. 2015.10.057

Mengetahui,
Ketua Program Studi S1 Farmasi,

apt. Onny Indriani, M.Farm.
NIP. 2014.10.025

LEMBAR PENGESAHAN

SKRIPSI

STUDI IN SILICO AKTIVITAS SENYAWA TUMBUHAN OBAT DI DALAM AL-QUR'AN DAN AL-HADITS TERHADAP TARGET RESEPTOR GLP-1 SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2

OLEH :

INDAH AMANDA WULANSARI

204820103019

Telah dipertahankan di depan Tim Penguji pada Tanggal 5 September 2024

Dosen Penguji :

- I. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm.
NIP: 2015.09.057 (.....)
- II. Suprayetno, S.Si., M.T
NIP. 2015.10.057 (.....)
- III. Ulik Alta, S.Farm., M.Kes
NIP. 2015.09..060 (.....)
- IV. Eka Fitriani, S.Farm., M.Farm
NIP. 2023.05.089 (.....)

LEMBAR PERSEMBAHAN

MOTTO

“ Setetes keringat orangtua ku, seribu langkah ku untuk maju “

Alhamdulillah, segala puji bagi Allah SWT yang telah memberikan saya nikmat yang luar biasa, memberikan kekuatan serta memberikan saya kemudahan dalam menyelesaikan Tugas Akhir saya dengan baik. Shalawat serta salam selalu dilimpahkan kepada baginda nabi Muhammad SAW.

Segala perjuangan yang sudah saya lalui hingga berada di titik ini, saya persembahkan teruntuk orang-orang yang selalu menjadi penyemangat dan menjadi alasan saya untuk kuat sehingga bisa menyelesaikan Skripsi ini.

1. Teruntuk Papaku Burhansyah cinta pertamaku, seseorang yang selalu menjadi penyelamatku, seseorang yang begitu berharga yang selalu menjadi tempatku berkeluh kesah dari kerasnya dunia. Yang tiada hentinya selalu memberika motivasi dan metril. Terimakasih pa selalu berjuang untuk kehidupan anakmu yang manja ini, sehat selalu dan hiduplah lebih lama lagi karena Papa harus selalu ada di dalam setiap prosesku.
2. Untuk pintu surgaku, Mama Megawati wanita yang begitu kuat, seorang yang selalu menjadi penerangku, seorang yang memperjuangkan nyawa agar aku bisa lahir kedunia ini, mama yang hebat yang selalu mengusahakan hal apapun agar anak tunggalnya selalu bahagia. Terimakasih banyak mama atas semua apa yang sudah mama usahakan sehingga penulis dapat menyelesaikan Tugas Akhir ini dengan baik, semoga mama selalu di berikan kesehatan serta umur yang panjang.
3. Teruntuk Alm. Mahayat Bin Muhammad, kakek saya yang sangat saya sayangi dan saya cintai. Terimakasih iyek (kakek) sudah pernah menjadi alasan saya untuk selalu bersemangat dalam menempuh pendidikan yang tinggi walaupun iyek(kakek) tidak bisa melihat cucunya lulus kuliah

secara langsung tapi semoga iyek(kakek) bahagia dengan melihat dari Surga-Nya Allah.

4. Dan yang terakhir untuk diri saya sendiri Indah Amanda Wulansari, terimakasih untuk sudah bertahan sejauh ini meskipun sudah banyak luka,pengorbanan, perjuangan yang dilalui untuk bisa berada dititik sekarang. Terimakasih untuk selalu mengusahakan hal-hal indah yang belum di coba untuk bertahan hidup. So proud of me.

DAFTAR RIWAYAT HIDUP



A. Biodata Mahasiswa

Nama Lengkap : Indah Amanda Wulansari
NIM : 204820103019
Tempat / Tanggal Lahir : Palembang, 23 Juni 2002
Jenis Kelamin : Perempuan
Agama : Islam
Kewarganegaraan : Indonesia
Alamat : Jl. Jendral Bambang Utoyo No. 27
Kel. Duku,. Kec Ilir Timur III
Telepon : 081368061291

B. Pendidikan

2008 – 2014 : SD Negeri 56 Palembang
2014 – 2017 : SMP Negeri 50 Palembang
2017 – 2020 : SMK Kesehatan Athalla Putra Palembang

SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama	: Indah Amanda Wulansari
Nomer Induk Mahasiswa	: 204820103019
Program Studi	: S1 Farmasi
Judul Skripsi	: Studi In Silico Aktivitas Senyawa Tumbuhan Obat Di Dalam Al-Qur'an Dan Al-Hadits Terhadap Target Reseptor Glp-1 Sebagai Antidiabetes Tipe 2

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi yang saya buat ini adalah asli karya saya sendiri bukan plagiat dan apabila dikemudian hari diketahui skripsi saya tersebut plagiat karena kesalahan saya sendiri maka saya bersedia diberi sanksi apapun oleh STIKES 'Aisyiyah Palembang. Saya tidak akan menuntut pihak manapun atas perbuatan saya tersebut.

Demikianlah surat pernyataan ini saya buat dengan sebenar benarnya dan dalam keadaan sehat.

Palembang, Agustus 2024

Yang membuat pernyataan

Indah Amanda Wulansari
NIM. 204820103019

HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai civitas STIKES ‘Aisyiyah Palembang, saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Indah Amanda Wulansari
NIM : 204820103019
Program Studi : S1 Farmasi
Jenis Karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada STIKES ‘Aisyiyah Palembang Hasil Bebas Royalti Non Eksklusif (*Non-Excusive Royalty-Free Right*) atas skripsi yang berjudul “ Studi In Silico Aktivitas Senyawa Tumbuhan Obat Di Dalam Al-Qur’an Dan Al-Hadits Terhadap Target Reseptor Glp-1 Sebagai Antidiabetes Tipe 2 “ beserta perangkat yang ada jika diperlukan. Dengan Hak Bebas Royalti Non Eksklusif ini STIKES ‘Aisyiyah berhak menyimpan, mengalih media/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Di buat di : STIKES ‘Aisyiyah Palembang

Pada Tanggal : Agustus 2024

Yang menyatakan

Indah Amanda Wulansari

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah rabbilalamin puji syukur kepada Allah SWT berkat Rahmat dan Karunia-Nyalah sehingga saya dapat menyelesaikan Skripsi dengan judul Studi In Silico Aktivitas Senyawa Tumbuhan Obat Di Dalam Al-Qur'an Dan Al-Hadits Terhadap Target Reseptor Glp-1 Sebagai Antidiabetes Tipe 2. Laporan Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk mengerjakan skripsi pada program studi S1-Farmasi di Stikes Aisyiyah Palembang.

Saya menyadari dalam penyusunan Skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak Oleh karena itu pada kesempatan ini kami ingin mengucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada :

1. Bapak Khorin, SKM.,M.kes., selaku ketua Stikes 'Aisyiyah Palembang yang telah menyediakan sarana dan prasarana dalam kegiatan belajar mengajar sehingga dapat tercapai dengan maksimal.
2. Ibu apt. Onny Indriani, M.Farm selaku ketua Program Studi S-1 Farmasi Stikes 'Aisyiyah Palembang yang telah memberikan dukungan sehingga segala kegiatan belajar mengajar berjalan dengan lancar.
3. Bapak Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm., dan bapak Suprayetno,S.Si.M.T., selaku pembimbing yang senantiasa memberikan bimbingan dan masukan perbaikan dalam penulisan Tugas Akhir ini.
4. Kepada segenap Dosen Prodi S1-Farmasi STIKES 'Aisyiyah Palembang, untuk segala dukungan, bimbingan, serta pengajaran yang sangat berharga selama proses perkuliahan
5. Kepada kedua orang tua saya Bapak Burhansyah dan Ibu Megawati atas semua kasih,cinta, semangat, serta doa doanya kepada saya sehingga saya berada di titik sekarang.
6. Terimakasih kepada Keluarga besar Alm. Mahayat bin Muhammad atas semua doa, support, serta dukungan untuk saya selama ini agar saya tidak mudah menyerah
7. Terimakasih kepada sahabat sekaligus keluarga, Azzahra Nur Susanti yang sudah kebersamai dan mendukung saya dari awal semester sampai sekarang

8. Terimakasih kepada teman-teman kelompok Kimia Komputasi (Andries Regita Cahyani, Dita Mutiasari, Jeri Alfa Rozi, & Ardeni) atas waktu dan tenaga selama penelitian untuk membantu saya menyelesaikan penelitian dengan baik
9. Kepada teman-teman WaCaNa (Azzahra, Faizah, Shifa, Chahya, Alana) teimakasih atas support yang selama ini di berikan, dan telinga sebagai pendengar setia
10. Kepada teman-teman angkatan 2020 S1-Farmasi terimakasih atas kebersamaannya selama 8 semester ini
11. Teruntuk Sahabatku (Fitriah Isnaini, Dona Ardianika, dan Eka Ruri Darma) sudah menjadi tempat berkeluh kesah dan selalu menemani hingga saat ini
12. Terimakasih kepada Rumah Sakit Graha Mandiri terutama Team Farmasi RS Graha Mandiri sudah memberikan saya kesempatan untuk bekerja sembari menyelesaikan Tugas Akhir perkuliahan dan selalu memberikan saya ilmu

Saya menyadari skripsi ini tidak luput dari berbagai kekurangan. Saya mengharapkan saran dan kritik demi kesempurnaan dan perbaikannya sehingga akhirnya skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi bidang kesehatan serta bisa dikembangkan lebih lanjut lagi.

Palembang, Agustus 2024

Indah Amanda Wulansari

**SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN 'AISYIYAH PALEMBANG
PROGRAM STUDI S1 FARMASI**

Skripsi, Agustus 2024

Indah Amanda Wulansari

**Studi In Silico Aktivitas Senyawa Tumbuhan Obat Di Dalam Al-Qur'an Dan
Al-Hadits Terhadap Target Reseptor Glp-1 Sebagai Anti Diabetes Tipe 2**

XIX, 75 Halaman, 5 tabel, 12 Gambar, 14 Daftar singkatan, 11 Lampiran

ABSTRAK

Latar belakang : World Health Organization(WHO) pada tahun 2020 memperkirakan bahwa hampir setengah dari semua kematian yang disebabkan oleh diabetes melitus yang terjadi sebelum usia 70 tahun. Beberapa tanaman yang diketahui memiliki aktivitas antidiabetes digunakan dalam penelitian obat, Penelitian ini dilakukan dengan metode Uji *In Silico* dengan target reseptor GLP-1 sebagai anti diabetes tipe 2. **Tujuan :** Untuk melakukan simulasi penambatan molekul dan melaksanakan simulasi dinamika molekul untuk melihat stabilitas senyawa. **Metode :** Studi *In Silico* dan simulasi dinamika molekul. **Hasil :** SBVS pada ligan senyawa tanaman obat terhadap reseptor GLP-1, didapatkan seledri (*Apium graveolens*) dengan kode LTS0097986 karena memiliki energi ikatan paling rendah yaitu -6,91 Kkal/mol, berat molekul sebesar 277,39 DA, terbentuk ikatan hidrogen Arg 121 dengan jarak ikatan hidrogen sebesar 2,29 Å. Hasil simulasi dinamika molekul seledri dipilih snapshot ke-20 -6,29 Kkal/mol jarak ikatan yaitu 1,91 Å < 3,5 Å. **Kesimpulan :** Tanaman obat seledri dengan kode LTS0097986 dianggap memiliki aktivitas senyawa yang stabil terhadap reseptor GLP-1 sebagai antidiabetes tipe 2.

Kata kunci : Diabetes Melitus, SBVS, Reseptor GLP-1, Simulasi Dinamika Molekul

Daftar Pustaka : XXIII (23) (2019-2024)

**HIGH SCHOOL OF HEALTH SCIENCE 'AISYIYAH PALEMBANG
UNDERGRADUATE PROGRAM OF PHARMACY**

Thesis, August 2024

Indah Amanda Wulansari

XIX, 75 Pages, 5 tables, 12 Figures, 14 List of abbreviations, 11 Appendices

ABSTRACT

Background : The World Health Organization (WHO) in 2020 estimated that nearly half of all deaths caused by diabetes mellitus occur before the age of 70. Several plants known to have antidiabetic activity are used in drug research. This study was conducted using the In Silico Testing method with the GLP-1 receptor as the target for type 2 diabetes. **Objective :** To conduct molecular docking simulations and perform molecular dynamics simulations to assess the stability of the compounds. **Method :** In Silico study and molecular dynamics simulation. **Results:** The SBVS of herbal compounds against the GLP-1 receptor showed that celery (*Apium graveolens*) with code LTS0097986 has the lowest binding energy of -6.91 Kcal/mol, a molecular weight of 277.39 DA, and forms a hydrogen bond with Arg 121 at a distance of 2.29 Å. The molecular dynamics simulation of celery selected snapshot 20 with a binding energy of -6.29 Kcal/mol and a bond distance of 1.91 Å < 3.5 Å. **Conclusion :** The herbal plant celery with code LTS0097986 is considered to have stable compound activity against the GLP-1 receptor as a type 2 diabetes antidiabetic.

Keywords: Diabetes Mellitus, SBVS, GLP-1 Receptor, Molecular Dynamics Simulation

Bibliography: XXIII (23) (2019-2024)

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN	iii
KATA PENGANTAR	xi
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR GAMBAR	xvi
DAFTAR TABEL	xvii
DAFTAR ISTILAH	xviii
BAB I. PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	2
C. Tujuan Penelitian	2
D. Manfaat Penelitian	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA.....	4
A. Tinjauan Pustaka	4
1. Definisi Diabetes Melitus.....	4
a. Diabetes Melitus Tipe	4
b. Diabetes Melitus Tipe 2	5
c. Diabetes Melitus Gestasional.....	5
2. Tanaman Obat Dalam Al-Qur'an dan Al-Hadits	6
3. Uji <i>In Silico</i>	22
a. Penambatan Molecular.....	23
b. Simulasi Dinamika Molecular	23
B. Landasan Teori.....	24
BAB III. METODE PENELITIAN.....	26
A. Desain Penelitian.....	26
B. Waktu dan Tempat Penelitian	26
C. Alat dan Bahan Penelitian	26
1. Alat	26
2. Bahan	26
D. Prosedur Kerja	28
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	32

A. Preparasi struktur 3D tanaman obat	32
B. SBVS (<i>Structure Based Virtual Screening</i>)	35
C. Simulasi Dinamika Molekul	41
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	46
A. Kesimpulan	46
B. Saran	46
Daftar Pustaka	47

DAFTAR GAMBAR

Gambar 3.1 Alur Prosedur Penelitian	31
Gambar 4.1 Struktur 3D dengan kode LTS0000795	35
Gambar 4.2 Struktur reseptor pdb3iol pure	36
Gambar 4.3 <i>Grid Box</i>	37
Gambar 4.4 a. Reseptor GLP-1	37
Gambar 4.5 ligan bawaan reseptor.....	37
Gambar 4.6 Tanaman obat seledri dengan energi ikatan -6,91 Kkal/mol LTS0097986 dengan asam amino Arg 121 dan Asp122	40
Gambar 4.7 Jarak ikatan hidrogen Arg 121	41
Gambar 4.8 Simulasi dinamika molekul dengan kode LTS0097986	41
Gambar 4.9 Grafik total energi potensial	42
Gambar 4.10 Ligan dengan energi ikatan -6,29 Kkal/mol pada <i>snaphooetke-20</i> berikatan dengan Arg 121 dan Asp 122	43
Gambar 4.11 Jarak ikatan tanaman seledri dengan kode LTS0097986	44

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Nama dan jumlah struktur tanaman obat	27
Tabel 4.1 Nama dan jumlah kandungan senyawa tanaman obat	33
Tabel 4.2 Data hasil screening ligand tanaman obat	38
Tabel 4.3 Ikatan asam amino dan nilai FBE	39
Tabel 4.4 Nilai RMSF dari LTS0097986	43

DAFTAR ISTILAH

CADD	: <i>Computer-aided drug design</i>
DM	: Diabetes Melitus
FBE	: <i>Free Binding Energy</i>
GLP-1	: <i>Glucagon Like Peptide</i>
HITS	: Penyaringan Throughput Tinggi
IR	: Resistensi Insulin
LC50	: Dosis Mematikan 50%
MSD	: <i>Molecular Dynamics Simulation</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
RMSD	: <i>Root-Mean-Square Deviation</i>
RMSF	: <i>Root Mean Square Fluctuation</i>
SMILES	: <i>Simplified Molecular Input Line Entry System</i>
T2DM	: <i>Type 2 Diabetic Mellitus</i>
WHO	: <i>Word Health Organization</i>

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Perangkat keras CPU Komputer	57
Lampiran 2. Monitor Ubuntu	57
Lampiran 3. Perangkat lunak YASARA- <i>structure</i>	57
Lampiran 4. Perangkat lunak <i>Discovery Studio</i>	58
Lampiran 5. <i>Lotus Natural Product</i>	58
Lampiran 6. Laman RCSB	59
Lampiran 7. Perintah <i>smi2.pdb.mcr</i>	59
Lampiran 8. Perintah <i>dock_runscreening.mcr</i>	60
Lampiran 9. Hasil Screening Ligand.....	67
Lampiran 10. Perintah BE Calculation.mcr	74
Lampiran 11. 1972_hasil.....	76