

**“STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA-  
SENYAWA BIOAKTIF DARI MENGGKUDU (*Morinda citrifolia*)  
TERHADAP RESEPTOR ANTIINFLAMASI COX-2 ”**



**SKRIPSI**

**Diajukan untuk memenuhi sebagian persyaratan  
mendapatkan gelar sarjana Farmasi  
di Universitas Al-Irsyad Cilacap**

**Disusun oleh:  
AGUS PURWANINGSIH  
NIM 207221022**

**PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA  
FAKULTAS FARMASI SAINS DAN TEKNOLOGI  
UNIVERSITAS AL-IRSYAD CILACAP  
2023**

**LEMBAR PERSETUJUAN SKRIPSI**

**“STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA-  
SENYAWA BIOAKTIF DARI MENGGUDU (*Morinda citrifolia*)  
TERHADAP RESEPTOR ANTIINFLAMASI COX-2 ”**

**SKRIPSI**

**Diajukan untuk memenuhi sebagian persyaratan  
mendapatkan gelar Sarjana Farmasi (S.Farm.)  
di Universitas Al-Irsyad Cilacap**

**Disusun oleh:**

**AGUS PURWANINGSIH  
207221022**

**Cilacap, 27 Januari 2023**

Pembimbing Utama

apt. Tri Fitri Yana Utami, M.Sc.  
NP. 1031016941

Pembimbing Pendamping

apt. Septiana Indratmoko, M.Sc.  
NP. 1031010737

Mengetahui,

Ketua Program Studi Farmasi Program Sarjana

apt. Nikmah Nuur Rochmah, M.Farm.  
NP. 1031018970

## HALAMAN PENGESAHAN SKRIPSI

# “STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA- SENYAWA BIOAKTIF DARI MENGGKUDU (*Morinda citrifolia*) TERHADAP RESEPTOR ANTIINFLAMASI COX-2 ”

Disusun oleh:

AGUS PURWANINGSIH  
207221022

Telah dipertahankan di hadapan Dewan Penguji Skripsi  
Program Studi S1 Farmasi  
Di Universitas Al-Irsyad Cilacap pada:

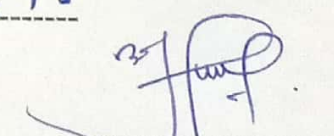
Hari : Sabtu

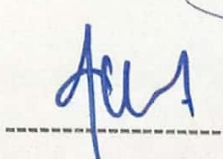
Tanggal : 11 Februari 2023

Dewan Penguji:

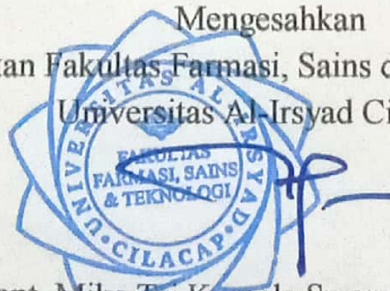
1. Lulu Setiyabudi, M.Si
2. apt. Tri Fitri Yana Utami, M.Sc.
3. apt. Septiana Indratmoko, M.Sc.

  
-----

  
-----

  
-----

Mengesahkan  
Dekan Fakultas Farmasi, Sains dan Teknologi  
Universitas Al-Irsyad Cilacap



apt. Mika Tri Kumala Swandari, M.Sc  
NP. 1031007614

## **PERNYATAAN**

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI MENKUDU (*Morinda citrifolia*) TERHADAP RESEPTOR ANTIINFLAMASI COX-2 ” belum pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga belum pernah ditulis atau dipublikasikan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Cilacap, Januari 2023

AGUS PURWANINGSIH

**“STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA-  
SENYAWA BIOAKTIF DARI MENGGKUDU (*Morinda citrifolia*)  
TERHADAP RESEPTOR ANTIINFLAMASI COX-2 ”**

**AGUS PURWANINGSIH**

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Al-Irsyad Cilacap

**ABSTRAK**

Peradangan dapat menyebabkan dan memicu banyak penyakit kronis diantaranya penyakit diabetes melitus tipe 2, *stroke*, iskemia serebral fokal dan kanker. Oleh karena itu, pentingnya mengatasi peradangan sehingga dapat mencegah penyakit lain yang dapat ditimbulkan. Namun penggunaan obat antiinflamasi golongan Anti Inflamasi Non Steroid (AINS) dan golongan steroid mempunyai efek samping dalam penggunaan jangka panjang. Penelitian ini bertujuan untuk membandingkan aktivitas senyawa bioaktif yang terkandung dalam mengkudu yaitu rutin, epicatechin, chrysin dan scopoletin sebagai antiinflamasi melalui penghambatan reseptor COX-2. Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu eksperimental yang dilakukan secara *in silico* dengan penambatan molekul. Hasil dari penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa bioaktif yang terkandung dalam mengkudu yaitu rutin, epicatechin, chrysin dan scopoletin berinteraksi dengan reseptor reseptor COX-2. . Interaksi yang terjadi yaitu adanya ikatan hidrogen, ikatan karbon hidrogen, ikatan pi-sigma, ikatan donor-donor, ikatan pi-alkil, ikatan pi-pi T-shaped, dan ikatan alkil. Senyawa mengkudu yaitu rutin, epicatechin, chrysin dan scopoletin memiliki hasil docking yaitu -8,8; -9,3, -9,6 dan -7,2 serta terdapat residu asam amino yang sama dengan ligan pembanding (Celecoxib). Persamaan residu menandakan bahwa senyawa mengkudu yaitu rutin, epicatechin, chrysin dan scopoletin dapat menjadi kandidat sebagai antiinflamasi.

**Kata kunci:** penambatan molekul, rutin, epicatechin, chrysin, scopoletin , COX-2

**"MOLECULAR DOCKING STUDIES OF BIOACTIVE COMPOUNDS  
FROM MENGKUDU (*Morinda citrifolia*)  
AGAINST COX-2 ANTI-INFLAMMATORY RECEPTORS "**

**AGUS PURWANINGSIH**

*Departement of Pharmacy, UNIVERSITAS AL-IRSYAD  
CILACAP*

**ABSTRACT**

Inflammation can cause and trigger many chronic diseases including type 2 diabetes mellitus, stroke, focal cerebral ischemia and cancer. Therefore, it is important to overcome inflammation so that it can prevent other diseases that can be caused. However, the use of anti-inflammatory drugs of the Non-Steroidal Anti-Inflammatory Group (AINS) and the steroid class has side effects in long-term use. This study aims to compare the activity of bioactive compounds contained in the purification, namely rutin, epicatechin, chrysin and scopoletin as anti-inflammatory through inhibition of COX-2 receptors. The method used in this study was experimental conducted in silico with molecular tethering. The results of this study show that the bioactive compounds contained in the hoof, namely rutin, epicatechin, chrysin and scopoletin interact with the COX-2 receptor. The interactions that occur are hidrogen bonds, karbon hidrogen bonds, pi-sigma bonds, donor-donor bonds, pi-alkil bonds, T-shaped pi-pi bonds, and alkil bonds. The compound of rutin, epicatechin, chrysin and scopoletin has a docking result of -8.8; -9.3, -9.6 and -7.2 and there are the same amino acid residues as the comparison ligands (Celecoxib). The residual equation indicates that the compounds of rutin, epicatechin, chrysin and scopoletin can be candidates as anti-inflammatories.

**Keywords:** molecular docking, rutin, epicatechin, chrysin, scopoletin , COX-2

## KATA PENGANTAR



Puji syukur penulis panjatkan kehadiran Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi dengan judul “STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI MENGGUDU (*Morinda citrifolia*) TERHADAP RESEPTOR ANTIINFLAMASI COX-2 ”.

Skripsi ini tidak akan selesai tanpa adanya bantuan dari banyak pihak, karena itu penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan karunia-Nya serta memberikan kemudahan dan kelancaran kepada kami.
2. Suami tercinta Subur Budi Yulianto dan putra tersayang Razqa Adhi Maulana dan Rafardhan Adhi Rafisqi yang senantiasa mencurahkan cinta dan kasih sayang, serta memberikan pengertian dan perhatian serta dukungan baik moril maupun materiil yang tak terhingga.
3. Bapak, ibu, ibu mertua, kakak, adik dan keluarga besar yang selalu mendukung dan mendoakan saya.
4. Bapak Sarwa, AMK., S.Pd., M.Kes selaku Rektor Universitas Al-Irsyad Cilacap.
5. Ibu apt. Mika Tri Kumala Swandari, M.Sc selaku Dekan Fakultas Farmasi, Sains dan Teknologi Universitas Al-Irsyad Cilacap.
6. Ibu apt. Nikmah Nuur Rochmah, M.Farm selaku Ketua Program Studi

S1Farmasi Universitas Al-Irsyad Cilacap.

7. Bapak Lulu Setiyabudi, M.Si., selaku penguji I yang memberikan arahan dan bimbingan sehingga Skripsi ini terselesaikan.
8. Ibu Tri Fitri Yana Utami, M.Sc., selaku penguji II dan Dosen Pembimbing I, yang telah meluangkan waktunya untuk membimbing dan mengarahkan dalam penyelesaian Skripsi ini.
9. Bapak apt. Septiana Indratmoko, M.Sc selaku penguji III dan Dosen Pembimbing II, yang telah meluangkan waktunya untuk membimbing dan mengarahkan dalam penyelesaian Skripsi ini.
10. Keluarga besar Universitas Al-Irsyad Cilacap, Seluruh dosen dan staf yang telah banyak membantu dalam menyelesaikan Skripsi ini.
11. Ibu Sri Rahayu, SKM.MM., selaku Kepala UPTD Puskesmas Cilacap Utara I yang telah memberikan ijin serta kebijaksanaan yang diberikan selama masa perkuliahan saya.
12. Keluarga besar UPTD Puskesmas Cilacap Utara I yang telah memberikan bantuan dan dukungan selama masa perkuliahan saya.
13. Sahabat-sahabat S1 Farmasi kelas alih jenjang, teman seperjuangan yang telah memberikan semangat dan dukungan selama masa perkuliahan.
14. Seluruh pihak yang telah banyak membantu yang tidak dapat saya sebutkan satu per satu.

Penulis menyadari bahwa banyak kekurangan dalam penulisan skripsi ini. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran untuk



menyempurnakannya. Namun demikian, penulis berharap semoga karya kecil ini bermanfaat bagi pembaca.

Cilacap, Februari 2023

Penulis

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PERSETUJUAN.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
HALAMAN PERNYATAAN .....	iv
HALAMAN ABSTRAK.....	v
HALAMAN ABSTRACT .....	vi
KATA PENGANTAR .....	vii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR GAMBAR .....	11
DAFTAR TABEL.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang .....	1
B. Perumusan Masalah .....	4
C. Tujuan Penelitian .....	4
D. Manfaat Penelitian .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
A. Tinjauan Pustaka .....	6
B. Kerangka Pemikiran.....	26
C. Hipotesis .....	27
BAB III METODE PENELITIAN.....	28

A. Metodologi Penelitian .....	28
B. Tempat dan Waktu Penelitian .....	28
C. Alat dan Bahan .....	29
D. Prosedur Penelitian.....	30
E. Skema Penelitian .....	33
F. Analisa Data .....	34
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	35
A. HASIL .....	35
B. PEMBAHASAN .....	53
BAB V KESIMPULAN, IMPLIKASI DAN SARAN .....	62
A. KESIMPULAN .....	62
B. IMPLIKASI.....	62
C. SARAN .....	62
DAFTAR PUSTAKA .....	63
LAMPIRAN-LAMPIRAN.....	68

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Rutin .....	9
Gambar 2. 2 Epicatechin .....	11
Gambar 2. 3 Chrysin .....	12
Gambar 2. 4 Scopoletin.....	13
Gambar 2. 5 Enzim COX-2.....	18
Gambar 2. 6 Celecoxib.....	19
Gambar 2. 7 Kerangka Pemikiran .....	26
Gambar 3. 1 Skema Penelitian .....	33
Gambar 4.1 Hasil pengunduhan bentuk kristal 3LN1.....	36
Gambar 4.2 COX-2 .....	39
Gambar 4.3 Interaksi Molekul Celecoxib terhadap Reseptor COX-2 pada 3LN1	40
Gambar 4.4 Interaksi Penambatan Molekul Celecoxib terhadap reseptor COX-2	44
Gambar 4.5 Interaksi Molekul Celecoxib terhadap Residu Asam Amino Reseptor COX-2.....	45
Gambar 4.6 Interaksi Penambatan Molekul Rutin terhadap reseptor COX-2 .....	46
Gambar 4.7 Interaksi Molekul Rutin terhadap Residu Asam Amino Reseptor COX- 2.....	47
Gambar 4.8 Interaksi Penambatan Molekul Epicatechin terhadap reseptor COX-2 .....	48
Gambar 4.9 Interaksi Molekul Epicatechin terhadap Residu Asam Amino Reseptor COX-2.....	49
Gambar 4.10 Interaksi Penambatan Molekul Chrysin terhadap reseptor COX-2 .	50

Gambar 4.11 Interaksi Molekul Chrysin terhadap Residu Asam Amino Reseptor COX-2.....	50
Gambar 4.12. Interaksi Penambatan Molekul Scopoletin terhadap reseptor COX-2 .....	51
Gambar 4.13. Interaksi Molekul Scopoletin terhadap Residu Asam Amino Reseptor COX-2.....	52
Gambar 4.14 Penambatan Molekul 3D terhadap Reseptor COX-2 .....	55

## DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Jadwal Waktu penelitian .....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
Tabel 4.1 Struktur senyawa.....	37
Tabel 4.2 Pengaturan gridbox .....	41
Tabel 4.3 Hasil <i>docking</i> molekuler terhadap ligan uji .....	43
Tabel 4.4 Jenis ikatan yang terbentuk pada interaksi ligan uji terhadap COX-2..	57
Tabel 4.5 Hasil Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	59

**DAFTAR LAMPIRAN**

Lampiran 1. Tampilan <i>Protein Bank Data</i> .....	70
Lampiran 2. Tampilan <i>Pubchem</i> .....	71
Lampiran 3. Tampilan <i>Pyrx-Virtual Screening Tools</i> .....	72
Lampiran 4. Tampilan <i>Discovery Studio Visualizer</i> .....	73
Lampiran 5. Tampilan <i>website</i> untuk mengakses uji <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	74