



# POTENSI SENYAWA AKTIF KULIT KAYU *Gmelina (Gmelina arborea)* SEBAGAI INHIBITOR SPIKE SARS-CoV-2 ASAL INDONESIA MELALUI UJI *IN SILICO*

MUHAMAD HADID HUSADA



DEPARTEMEN BIOKIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
INSTITUT PERTANIAN BOGOR  
BOGOR  
2021

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang:  
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :  
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah  
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.  
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



*@Hak cipta milik IPB University*

IPB University



IPB University

BoGOR IndOnesiA

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang :

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perustakaan IPB University



## PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Potensi Senyawa Aktif Kulit Kayu *Gmelina (Gmelina arborea)* sebagai Inhibitor Spike SARS-CoV-2 Asal Indonesia Melalui Uji *In Silico*” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Juli 2021

MUHAMAD HADID HUSADA

G84170064



*@Hak cipta milik IPB University*

IPB University



IPB University

Deponer Indonesia

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang :

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :

- a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perustakaan IPB University

## ABSTRAK

MUHAMAD HADID HUSADA. Potensi Senyawa Aktif Kulit Kayu *Gmelina* (*Gmelina arborea*) sebagai Inhibitor Spike SARS-CoV-2 Asal Indonesia Melalui Uji In Silico. Dibimbing oleh SYAMSUL FALAH, LAKSMI AMBARSARI dan RINI KURNIASIH

Jati putih (*Gmelina arborea*) merupakan tanaman yang memiliki aktivitas antioksidan dari famili *Verbenaceae*. Tanaman ini biasanya dijadikan obat antidiabetes, memiliki aktivitas antioksidan, dapat meregenerasi sel serta aktivitas insektisida pada tanaman. Protein spike terdiri dari dua subunit, yaitu S1 dan S2. Subunit 1 memiliki domain pengikatan reseptor (*Receptor Binding Domain/RBD*) sedangkan Subunit S2 untuk proses fusi virus dengan membran. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis senyawa aktif dari kulit kayu *Gmelina* (*Gmelina arborea*) sebagai inhibitor dalam interaksi Spike SARS-CoV-2 asal Indonesia dengan reseptor ACE2. Senyawa aktif yang digunakan yaitu *gmelinol*; 4-(2hydroxyethyl) phenol[2(4 hydroxyphenyl)ethanol] ;(+) *balanophonin* ;2,6 dimethoxy-p-benzoquinone; 3,4,5- trimethoxyphenol, serta ligan pembanding yaitu *emodin* dan *luteolin*. Parameter yang menjadi acuan yaitu energi afinitas ( $\Delta G$ ), konstanta inhibisi ( $K_i$ ), serta jenis interaksinya (kompetitif). *Balanophonin* memiliki potensi yang paling tinggi di antara ligan uji lainnya karena memiliki nilai energi afinitas ikatan yang paling tinggi yaitu -5,6 kcal/mol, serta berbanding lurus dengan  $K_i$  sebesar 78,10  $\mu M$ .

Kata kunci: *Balanophonin*, *Gmelina Arborea*, *In Silico*, Protein Spike, Senyawa aktif,

## ABSTRACT

MUHAMAD HADID HUSADA. The potential of white teak wood (*Gmelina arborea*) active compounds as Spike SARS-CoV-2 inhibitor from Indonesia through *in-silico* test. Supervised by SYAMSUL FALAH, LAKSMI AMBARSARI and RINI KURNIASIH.

White teak (*Gmelina arborea*) is a plant from *Verbenaceae* family that has antioxidant activities. This plant is usually used as antidiabetic medicine, antioxidant activities, cell regeneration and insecticidal activity for plants. The spike protein consists of the two subunits: S1 and S2. Subunit 1 has the *receptor binding domain* (RBD), while Subunit 2 is used as viral fusion process with the membrane. The aim for this research was to analyze active compounds from *Gmelina arborea* teak bark as the inhibitor in the interaction of Spike SARS-CoV-2 from Indonesia with ACE2 receptor. The active compounds that were being

analyzed were *Gmelinol*; *4-(2-hydroxyethyl)-phenol* [*2-(4-hydroxyphenyl)-ethanol*] ; (+)*Balanophonin* ; *2,6dimethoxy-p-benzoquinone* ; *3,4,5-trimethoxyphenol*, with *Emodin* and *Luteolin* as the ligands comparison. The parameters for the references were Affinity energy ( $\Delta G$ ), inhibition constant ( $K_i$ ), and the interaction type (competitive). *Balanophonin* has the highest potential among other ligands since it has the highest binding affinity energy of  $-5,6$  kcal / mol, and it is directly proportional to the  $K_i$  value of  $78,10$   $\mu\text{M}$ .

Keywords: Active compounds, *balanophonin*, *Gmelina arborea*, In Silico, spike protein,



1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang menggunakan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

@Hak cipta milik IPB University

IPB University

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang :
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
    - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
    - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
  2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 20XX<sup>1</sup>  
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

*Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.*

*Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.*



**POTENSI SENYAWA AKTIF KULIT KAYU *Gmelina (Gmelina arborea)* SEBAGAI INHIBITOR SPIKE SARS-CoV-2 ASAL INDONESIA MELALUI UJI *IN SILICO***

**MUHAMAD HADID HUSADA**

Skripsi  
Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana pada  
Program studi Biokimia

**DEPARTEMEN BIOKIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
INSTITUT PERTANIAN BOGOR  
BOGOR  
2021**



@Hak cipta milik IPB University

IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang :

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

- 1 Dr. Mega Safithri, S.Si., M.Si
- 2 Dr. rer. nat. Rahadian Pratama, S.Si., M.Si



*@Hak cipta milik IPB University*

IPB University



- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang :
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
    - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
    - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
  2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Judul: Potensi Senyawa Aktif Kulit Kayu *Gmelina (Gmelina arborea)* sebagai Inhibitor Spike SARS-CoV-2 Asal Indonesia Melalui Uji *In Silico*

Nama: Muhamad Hadid Husada

NIM : G84170064

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Dr. Syamsul Falah, S.Hut, M.Si



Pembimbing 2:

Dr. Dra. Laksmi Ambarsari, MS



Pembimbing 3:

Rini Kurniasih, S.Si, M.Si



Diketahui oleh

Ketua Departemen Biokimia

Dr. Syamsul Falah, S.Hut, M.Si

NIP. 19700503 200501 1 001



Tanggal Ujian: 22 Juli 2021

Tanggal Lulus:

## PRAKATA

Puji dan syukur penulis sampaikan kehadirat Allah SWT atas berkah dan rahmatnya sehingga dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Potensi Senyawa Aktif Kulit Kayu *Gmelina (Gmelina arborea)* sebagai Inhibitor Spike SARS-CoV-2 Asal Indonesia Melalui Uji *In Silico*” skripsi ini merupakan salah satu syarat untuk melakukan penelitian dalam rangka tugas akhir di Departemen Biokimia.

Penulis mengucapkan terimakasih atas dukungan dan doa dari berbagai pihak yang terlibat dalam penyusunan skripsi. Ucapan terimakasih secara khusus penulis sampaikan kepada bapak Dr. Syamsul Falah, S.Hut, M.Si selaku pembimbing pertama skripsi dan ibu Dr. Dra. Laksmi Ambarsari, MS sebagai pembimbing kedua skripsi, serta pembimbing ketiga ibu Rini Kurniasih, S.Si, M.Si yang telah memberi masukan dan saran untuk kelancaran penyusunan Skripsi. Ucapan terimakasih juga penulis sampaikan kepada keluarga dan rekan-rekan biokimia angkatan 2017 atas dukungan dan bantuan selama pengerjaan skripsi serta seluruh pihak yang telah membantu dalam penyusunan usulan penelitian.

Penulis menyampaikan permohonan maaf apabila terdapat kesalahan dalam penulisan. Kritik dan saran yang membangun dari pembaca senantiasa penulis harapkan demi kebaikan di masa mendatang. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi penulis, pembaca, dan kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juni 2021

MUHAMAD HADID HUSADA

## DAFTAR ISI

ABSTRAK .....	i
PRAKATA .....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR TABEL .....	viii
DAFTAR LAMPIRAN .....	viii
I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	2
1.3 Tujuan .....	2
1.4 Hipotesis .....	2
1.5 Manfaat .....	3
1.6 Waktu dan Tempat .....	3
II TINJAUAN PUSTAKA .....	4
2.1 Gmelina ( <i>Gmelina arborea</i> Roxb) .....	4
2.2 RBD ( <i>Receptor Binding Domain</i> ) Spike .....	5
2.3 Penambatan Molekul .....	7
III METODE PENELITIAN .....	9
3.1 Alat dan Bahan .....	9
3.2 Prosedur .....	9
IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	12
4.1 Hasil .....	12
4.2 Pembahasan .....	20
V SIMPULAN DAN SARAN .....	27
5.1 Simpulan .....	27
5.2 Saran .....	27
DAFTAR PUSTAKA .....	29
LAMPIRAN .....	35



## DAFTAR GAMBAR

1. Tumbuhan jati putih ( <i>Gmelina arborea</i> )	4
2. Mekanisme infeksi SARS-CoV-2 terhadap ACE2	5
3. Struktur keseluruhan SARS-CoV-2 RBD	6
4. Aplikasi utama docking molekuler	8
5. Karakteristik reseptor RBD <i>Spike</i> hasil pemodelan	12
6. hasil analisis <i>Multiple Sequence Alignments</i> (MSA)	13
7. Tampilan superimpose antara template 6zgg dan RBD <i>Spike</i>	14
8. Ramachandran Plot	14
9. Visualisasi 2D <i>Luteolin</i>	20
10. Visualisasi 2D <i>Balanophonin</i>	21

## DAFTAR TABEL

1. Hasil analisis homologi sekuen RBD <i>Spike</i> asal pasien Indonesia	13
2. Analisis toksisitas ligan uji dan pembandingan dengan aturan Lipinski	15
3. Analisis ADME ligan uji dan pembandingan dengan ADME	16
4. Analisis toksisitas ligan menggunakan admetsar1	17
5. Interaksi visualisasi ligan uji dan pembandingan terhadap reseptor	19

## DAFTAR LAMPIRAN

1. Skema penelitian	39
2. Anggaran penelitian	39
3. Gambar ligan uji	39
4. Gambar ligan pembandingan	40
5. Gambar deskripsi genom EPI_ISL_467376	41
6. Gambar hasil blast GISAID	42
7. Hasil visualisasi interaksi ligan dan reseptor secara 2D dan 3D	42
8. Nilai $\Delta G$ dari hasil penambatan molekuler ligan uji dengan reseptor	44
9. Contoh perhitungan $K_i$	46