

IDENTIFIKASI DAN INTERAKSI MOLEKULER SENYAWA BIOAKTIF BUAH PARE (*Momordica charantia* L.) TERHADAP RESEPTOR XANTIN OKSIDASE *IN SILICO*

I KETUT MEDIARTHA



DEPARTEMEN BIOKIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026

@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.

Perpustakaan 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.



PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Identifikasi dan Interaksi Molekuler Senyawa Bioaktif Buah Pare (*Momordica charantia* L.) terhadap Reseptor Xantin Oksidase *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 2026

I Ketut Mediartha
G84190019

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



@Hak cipta milik 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.

ABSTRAK

I KETUT MEDIARTHA. Identifikasi dan Interaksi Molekuler Senyawa Bioaktif Buah Pare (*Momordica charantia* L.) terhadap Reseptor Xantin Oksidase *In Silico*. Dibimbing oleh UKHRADIYA MAGHARANIQ SAFIRA PURWANTO dan RINI KURNIASIH.

Hiperurisemia dipicu oleh aktivitas berlebih dari enzim xantin oksidase menyebabkan penyakit kardiovaskular yang parah. Ekstrak etanol dan air buah pare (*Momordica charantia* L.) diketahui mampu menekan sintesis asam urat, namun mekanisme molekulernya masih belum diteliti lebih lanjut. Penelitian ini bertujuan mengidentifikasi senyawa bioaktif dari buah pare (NusaFarm) dan mengevaluasi interaksi molekulernya terhadap reseptor xantin oksidase (PDB ID: 1FIQ) secara *in silico*. Metode maserasi menggunakan etanol 96% dan analisis LC-HRMS berhasil menganotasi 132 senyawa yang didominasi oleh asam karboksilat, tanpa adanya senyawa penciri utama. Senyawa penciri minor yang terdeteksi meliputi *coumarin* dan *benzaldehyde*. Uji bioavailabilitas, ADME, prediksi toksisitas, serta penapisan virtual (ΔG_{bind} and Kd) dievaluasi dengan membandingkannya terhadap asam salisilat dan allopurinol. Hasil penapisan menunjukkan tiga senyawa tidak toksik, namun senyawa dengan interaksi molekuler dan afinitas terbaik *coumarin* tetap divisualisasikan sebagai senyawa penuntun. Senyawa 4-Nitroaniline menunjukkan interaksi molekuler dan afinitas baik terhadap reseptor 1FIQ dengan nilai ΔG_{bind} sebesar -6,6790 kkal/mol dan nilai Kd sebesar 8,8436 μM .

Kata kunci: buah pare, hiperurisemia, *in silico*, LC-HRMS, xantin oksidase.

ABSTRACT

I KETUT MEDIARTHA. Identification and Molecular Interaction of Bioactive Compounds from Bitter Melon (*Momordica charantia* L.) with Xanthine Oxidase Receptor *In Silico*. Supervised by UKHRADIYA MAGHARANIQ SAFIRA PURWANTO and RINI KURNIASIH.

Hyperuricemia triggered by the overactivity of the xanthine oxidase enzyme, leads to severe cardiovascular diseases. Ethanol and aqueous extracts of bitter gourd (*Momordica charantia* L.) suppress uric acid synthesis, yet its molecular mechanism remains unexplored. This study identified the bioactive compounds from bitter gourd (NusaFarm) and evaluated their molecular interactions with the xanthine oxidase (PDB ID: 1FIQ) receptor *in silico*. Maceration using 96% ethanol followed by LC-HRMS analysis successfully annotated 132 compounds, predominantly carboxylic acids, with no major marker compounds detected. Minor marker compounds detected included coumarin and benzaldehyde. Bioavailability, ADME, toxicity prediction, and virtual screening (ΔG_{bind} and Kd) were evaluated and compared them against salicylic acid and allopurinol. Screening results revealed three non-toxic compounds; however, coumarin — which exhibited the best molecular interaction and affinity — was still visualized as a lead compound.. 4-Nitroaniline demonstrated strong molecular interaction and good affinity toward the 1FIQ receptor, with a ΔG_{bind} value of -6,6790 kcal/mol and a Kd value of 8,8436 μM .

Keywords: bitter gourd, hyperuricemia, *in silico*, LC-HRMS, xanthine oxidase



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 2026
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.



IDENTIFIKASI DAN INTERAKSI MOLEKULER SENYAWA BIOAKTIF BUAH PARE (*Momordica charantia* L.) TERHADAP RESEPTOR XANTIN OKSIDASE SECARA *IN SILICO*

I KETUT MEDIARTHA

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
2026**



@Hak cipta milik 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 Prof. Dr. Waras Nurcholis, S.Si., M.Si.
- 2 Prof. Dr. Ir. I Made Artika, M.App.Sc.



Judul Skripsi : Identifikasi dan Interaksi Molekuler Senyawa Bioaktif Buah Pare (*Momordica charantia* L.) terhadap Reseptor Xantin Oksidase *In Silico*

Nama : I Ketut Mediartha
NIM : G84190019

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Ukhradiya Magharaniq Safira P. S.Si., M.Si.



Pembimbing 2:
Rini Kurniasih, S.Si., M.Si.

Diketahui oleh

 Ketua Departemen Biokimia
Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si., M.Si.
NIP. 197709152005012002



Tanggal Ujian:
(22 Juni 2026)

Tanggal Lulus:
(...)



@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.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini dapat diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Juni 2025 hingga bulan Desember 2025 ini ialah Biokimia Analisis, dengan judul “Identifikasi dan Interaksi Molekuler Senyawa Bioaktif Buah Pare (*Momordica charantia* L.) terhadap Reseptor Xantin Oksidase *In Silico*”.

Penulis menyampaikan terima kasih kepada Ukhradiya Magharaniq Safira P., S.Si., M.Si. selaku pembimbing pertama dan Rini Kurniasih, S.Si., M.Si. selaku pembimbing kedua yang telah membimbing, memberikan arahan, kritik, serta saran yang membangun dalam pembuatan karya ilmiah ini. Penulis secara khusus ingin mengucapkan terima kasih kepada kedua orang tua yang telah sabar, setia menemani serta memberikan doa dan dukungan baik secara materiil maupun immateriil. Penulis juga menyampaikan terima kasih kepada Ir. Ngakan Komang Kutha Ardana, M.Sc. dan Gusti Ayu Nyoman Mas Puspawati selaku ‘orang tua’ di Bogor yang telah memberikan banyak dukungan moral kepada penulis dalam menyusun tugas akhir.

Penulis mengucapkan terimakasih kepada Alfari Andiqa Muhammad, S.Si., M.Si., Aisyah Rayhan Rinka Pratiwi S.Si., M.Si., Devi Tulak Astuti, Mahanani Dini Pertiwi, S.Si., dan Novian Liwanda, S.Si., M.Si. yang telah mendampingi dan memberikan ilmu kepada penulis selama kegiatan di Laboratorium Biokimia. Berikutnya kepada teman-teman dekat, yaitu Indah Tasya Mustika, S.Si., Hamidatul Mubayinnah, S.Si., Rifqy Zainur Rofiq yang selalu memberikan semangat dan setia menemani penulis dalam menyelesaikan tugas akhir

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juli 2026

I Ketut Mediartha

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 mengumunkan 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.

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Hipotesis	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Buah Pare	3
2.2 Hiperurisemia	4
2.3 Xantin Oksidase	5
2.4 <i>Liquid Chromatography-High Resolution Mass Spectrometry (LC-HRMS)</i>	6
2.5 Bioavailabilitas Ligan	8
2.6 ADME (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, dan Ekskresi) Ligan	8
2.7 Toksisitas Ligan	9
2.8 Penapisan Virtual	9
III METODE	11
3.1 Waktu dan Tempat	11
3.2 Alat dan Bahan	11
3.3 Prosedur Kerja	11
IV HASIL	15
4.1 Kadar Air dan Rendemen Ekstrak Etanol 96% Buah Pare	15
4.2 Profil Senyawa Anotasi LC-HRMS Ekstrak Etanol 96% Buah Pare	15
4.3 Prediksi Bioavailabilitas Ligan Uji secara <i>In Silico</i>	16
4.4 Validasi Metode Penapisan Virtual	16
4.5 Penapisan Senyawa Hasil Anotasi LC-HRMS Buah Pare	16
4.6 Prediksi Toksisitas dan Absorpsi Distribusi Metabolisme Ekskresi (ADME) secara <i>In Silico</i>	17
4.7 Visualisasi Ligan Terbaik Hasil Penapisan Virtual	19
V PEMBAHASAN	25
5.1 Kadar Air dan Rendemen Ekstrak Etanol 96% Buah Pare	25
5.2 Profil Senyawa Anotasi LC-HRMS Ekstrak Etanol 96% Buah Pare	26
5.3 Prediksi Bioavailabilitas Ligan Uji secara <i>In Silico</i>	28
5.4 Validasi Metode Penapisan Virtual	29
5.5 Penapisan Virtual Senyawa Bioaktif Buah Pare	30
5.6 Prediksi Toksisitas dan Absorpsi Distribusi Metabolisme Ekskresi (ADME) secara <i>In Silico</i>	31
5.7 Visualisasi Ligan Terbaik Hasil Penapisan Virtual	32



VI	SIMPULAN DAN SARAN	35
6.1	Simpulan	35
6.2	Saran	35
	DAFTAR PUSTAKA	36
	LAMPIRAN	46
	RIWAYAT HIDUP	64

Hak cipta milik 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.

DAFTAR TABEL

1	Kategori toksisitas oral akut	9
2	Lima senyawa hasil anotasi LC-HRMS ekstrak etanol 96% buah pare	15
3	Penapisan virtual 13 senyawa bioaktif buah pare	17
4	Prediksi toksisitas senyawa aktif buah pare	18
5	Prediksi ADME senyawa aktif buah pare	19
6	Residu pengikatan ligan-reseptor	20

DAFTAR GAMBAR

1	Buah pare (<i>Momordica charantia</i> L.)	3
2	Jalur degradasi nukleotida purin	5
3	Struktur kristal xantin oksidase	6
4	Instrumentasi LC-HRMS	7
5	Pose asam salisilat pada kristal 1FIQ dan hasil penambatan molekuler	16
6	Visualisasi interaksi residu asam amino dengan asam salisilat	21
7	Visualisasi interaksi residu asam amino dengan allopurinol	22
8	Visualisasi interaksi residu asam amino dengan <i>coumarin</i>	22
9	Visualisasi interaksi residu asam amino dengan <i>4-Nitroaniline</i>	23
10	Visualisasi interaksi residu asam amino dengan <i>2,3,4,9-Tetrahydro-1H-β-carboline-3-carboxylic acid</i>	23
11	Visualisasi interaksi residu asam amino dengan <i>lenacil</i>	24

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram alir penelitian	47
2	Kadar air dan rendemen ekstrak	48
3	Waktu retensi senyawa dalam ekstrak etanol 96% buah pare	49
4	Anotasi senyawa buah pare	50
5	Validasi penapisan virtual	56
6	Prediksi bioavailabilitas	57
7	Hasil penapisan virtual	61