

DESAIN *SCAFFOLD PROTEIN* BERBASIS KECERDASAN BUATAN UNTUK DETEKSI BIOMARKER DEMAM BERDARAH DENGUE (DBD)

EVAN JOENATHAN



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



PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Desain *Scaffold Protein* Berbasis Kecerdasan Buatan Untuk Deteksi Biomarker Demam Berdarah Dengue (DBD)” 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, Maret Tahun 2026

Evan Joenathan
G8401221042



ABSTRAK

EVAN JOENATHAN. Desain *Scaffold Protein* Berbasis Kecerdasan Buatan Untuk Deteksi Biomarker Demam Berdarah Dengue (DBD). Dibimbing oleh LAKSMI AMBARSARI, INDA SETYAWATI, KENI VIDILASERIS.

C-Reactive Protein (CRP) merupakan biomarker untuk demam berdarah dengue yang mampu memprediksi perkembangan fase demam berdarah melalui perubahan konsentrasinya di dalam darah. Penelitian ini bertujuan mendesain *scaffold protein* berbantuan kecerdasan buatan atau *Artificial Intelligence* (AI) untuk mendeteksi CRP yang merupakan biomarker DBD. *Scaffold protein* didesain menggunakan RFDiffusion, ProteinMPNN, dan AlphaFold3. Desain *scaffold protein* CRP yang didapatkan memiliki nilai konstanta disosiasi (Kd) sebesar 130 nM berdasarkan hasil prediksi PRODIGY, menunjukkan afinitas yang memadai untuk mendeteksi CRP pada konsentrasi relevan dalam darah pasien demam berdarah. *Binder* yang didesain memiliki nilai pI teoritis 6.97 sehingga memerlukan pendekatan ekspresi yang tepat untuk mendukung kelarutan dan stabilitasnya di dalam sel. Simulasi MD menunjukkan adanya interaksi CRP-*binder*, mendukung potensi *binder* sebagai kandidat biosensor untuk mendeteksi CRP.

Kata kunci: *C-Reactive Protein* (CRP), demam berdarah, desain protein *de novo*, desain *scaffold protein*

ABSTRACT

EVAN JOENATHAN. Artificial Intelligence Based Scaffold Protein Design to Detect Biomarker for Dengue Fever. Supervised by LAKSMI AMBARSARI, INDA SETYAWATI, KENI VIDILASERIS.

C-Reactive Protein (CRP) is a biomarker for dengue fever that can predict disease progression through changes in its blood concentration. This study aimed to design a protein scaffold assisted by Artificial Intelligence (AI) to detect CRP as a biomarker of dengue fever. The scaffold protein was designed using RFDiffusion, ProteinMPNN, and AlphaFold3. The resulting CRP scaffold design exhibited a dissociation constant (Kd) of 130 nM based on PRODIGY prediction, indicating sufficient affinity to detect CRP at clinically relevant concentrations in dengue patients. The designed binder has a theoretical pI of 6.97, requiring an appropriate expression strategy to support its solubility and stability in cells. Molecular dynamics (MD) simulations confirmed CRP-binder interactions, reinforcing the potential of the binder as a candidate biosensor for CRP detection.

Keywords: C-Reactive Protein (CRP), dengue fever, *de novo* protein design, scaffold protein design



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 2026¹
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.

DESAIN *SCAFFOLD PROTEIN* BERBASIS KECERDASAN BUATAN UNTUK DETEKSI BIOMARKER DEMAM BERDARAH DENGUE (DBD)

EVAN JOENATHAN

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. Dr. Syaefudin, S.Si, M.Si.
2. Prof. Dr. drh. Hasim, DEA



Judul Skripsi : Desain *Scaffold Protein* Berbasis Kecerdasan Buatan untuk Deteksi Biomarker Demam Berdarah Dengue (DBD)

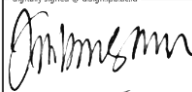
Nama : Evan Joenathan
NIM : G8401221042

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Prof. Dr. Dra. Laksmi Ambarsari, M.S.

Pembimbing 2:
Dr. Inda Setyawati, S.T.P., M.Si.

Pembimbing 3:
Keni Vidilaseris, PhD.

digitally signed @ design.ipb.ac.id

STMFCAE:075462D9B34C5B0CA99F35

digitally signed @ design.ipb.ac.id

STMFCAE:075462D9B34C5B0CA99F35



Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si, M.Si.
NIP 197709152005012002

Tanggal Ujian: 17 Juni 2026

Tanggal Lulus:



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa atas segala karunia-Nya sehingga skripsi ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Mei 2025 sampai bulan Maret 2026 ini adalah desain protein, dengan judul *Desain Scaffold Protein* Berbasis Kecerdasan Buatan Untuk Deteksi Biomarker Demam Berdarah Dengue (DBD)”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada Prof. Dr. Dra. Laksmi Ambarsari, M.S. selaku pembimbing pertama, Dr. Inda Setyawati, S.T.P., MSi. selaku pembimbing kedua, dan Keni Vidilaseris, PhD. selaku pembimbing ketiga yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada keluarga, mentor, dan teman-teman yang namanya tidak disebutkan di sini, yang telah memberikan banyak dukungan dan doa.

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

Bogor, Maret 2026

Evan Joenathan



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	ix
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Demam Berdarah Dengue (DBD)	4
2.2 <i>C-Reactive Protein</i> (CRP)	5
2.3 <i>Scaffold Protein</i>	6
III METODE	7
3.1 Waktu dan Tempat	7
3.2 Alat dan Bahan	7
3.3 Prosedur Kerja	7
3.4 Analisis Data	10
IV HASIL	11
4.1 Model Molekuler	11
4.2 Analisis Konservasi Residu	12
4.3 Desain Binder	13
4.4 Validasi Struktur	15
4.5 Validasi Afinitas	16
4.6 Validasi Solubilitas	18
4.7 Simulasi <i>Molecular Dynamics</i>	19
V PEMBAHASAN	24
VI SIMPULAN DAN SARAN	29
6.1 Simpulan	29
6.2 Saran	29
DAFTAR PUSTAKA	30
LAMPIRAN	34
RIWAYAT HIDUP	40



DAFTAR TABEL

1	Daftar Model Molekul <i>Human-CRP</i>	11
2	Desain <i>binder</i> RFDiffusion	14
3	Desain <i>binder</i> RFDiffusion (Lanjutan Tabel 2)	15
4	Hasil prediksi oleh PRODIGY	17
5	Hasil perhitungan muatan <i>Binder</i>	19

DAFTAR GAMBAR

1	Bentuk pentamer dari CRP	5
2	<i>Binding Hotspot</i> dan Letaknya pada 1B09	12
3	Tingkat konservasi residu CRP bagian <i>hotspot</i>	13
4	Tingkat konservasi residu CRP bagian sisi aktif	13
5	Hasil AlphaFold3 Desain 6	15
6	Hasil AlphaFold3 Desain 7	16
7	Hasil AlphaFold3 Desain 8	16
8	(A) Desain final <i>binder</i> dan (B) Kompleks pentamerik CRP- <i>Binder</i>	17
9	Hasil AlphaFold3 <i>binder</i> dengan sekuens baru	17
10	Hasil AlphaFold3 <i>binder</i> dengan sekuens baru dalam bentuk pentamer	18
11	Interaksi CRP dengan fosfokolin	20
12	Konservasi residu Asn145 dan letaknya dalam kompleks CRP- <i>binder</i>	21
13	Plot RMSF CRP – <i>Binder</i>	21
14	Plot jarak Glu81 – Fosfokolin	22
15	Plot jarak Asp140 - Ion kalsium	22
16	Plot jarak Asn145 (CRP) - Arg7 (<i>Binder</i>)	22
17	Plot jarak Asn145 (CRP) - Arg10 (<i>Binder</i>)	23
18	Plot energi bebas Gibbs kompleks CRP - <i>Binder</i> (MMGBSA)	23

DAFTAR LAMPIRAN

1	<i>Python Script</i> untuk Validasi Solubilitas	38
2	Intepretasi skor konservasi Consurf	38
3	Diagram alir metode penelitian	39