

# **DESAIN PROTEIN SCAFFOLD SINTETIK BERBASIS PROTEINMPNN UNTUK DETEKSI BIOMARKER KANKER SERVIKS**

**SAMUEL GERALDY**



**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.

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

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Desain Protein *Scaffold* Sintetik Berbasis ProteinMPNN untuk Deteksi Biomarker Kanker Serviks” 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.

Bali, Agustus 2026

*Samuel Gerald*  
G84190059



@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

## ABSTRAK

SAMUEL GERALDY. Desain Protein Scaffold Sintetik Berbasis ProteinMPNN untuk Deteksi Biomarker Kanker Serviks. Dibimbing oleh INDA SETYAWATI dan KENI VIDILASERIS.

Kanker serviks merupakan salah satu penyebab utama kematian akibat kanker pada perempuan, dan onkoprotein E7 dari *Human papillomavirus* risiko tinggi berpotensi menjadi biomarker untuk deteksi dini. Penelitian ini bertujuan mendesain protein *scaffold* sintetik secara *in silico* yang mampu mengenali domain CR3 onkoprotein E7 sebagai kandidat elemen pengenalan biosensor. Daerah *hotspot* pada E7 ditentukan melalui analisis konservasi residu menggunakan ConSurf dengan residu R19 sebagai *anchor*. *Binder* dirancang menggunakan RFdiffusion dan ProteinMPNN, kemudian divalidasi struktur kompleksnya menggunakan AlphaFold3, afinitasnya menggunakan PRODIGY, serta solubilitasnya melalui estimasi muatan permukaan dan titik isoelektrik. *Binder* hasil desain berupa rantai  $\alpha$ -heliks sepanjang 35 residu yang membentuk kompleks stabil dengan E7, ditunjukkan oleh nilai ipTM 0,84 (monomer) dan 0,80 (dimer). Prediksi afinitas menghasilkan nilai konstanta disosiasi ( $K_d$ ) sebesar 56 nM pada konformasi dimer, sedangkan estimasi solubilitas menunjukkan muatan permukaan  $-3,00$  e dan titik isoelektrik 3,90 yang mengindikasikan kelarutan yang baik. Hasil ini menunjukkan bahwa *binder* rancangan berpotensi dikembangkan sebagai elemen pengenalan untuk deteksi biomarker kanker serviks.

Kata kunci: AlphaFold3, kanker serviks, onkoprotein E7, protein scaffold, ProteinMPNN

## ABSTRACT

SAMUEL GERALDY. Design of a ProteinMPNN-Based Synthetic Protein Scaffold for the Detection of a Cervical Cancer Biomarker. Supervised by INDA SETYAWATI and KENI VIDILASERIS.

Cervical cancer is one of the leading causes of cancer-related death in women, and the E7 oncoprotein of high-risk *Human papillomavirus* is a promising biomarker for its early detection. This study aimed to design, *in silico*, a synthetic protein *scaffold* capable of recognizing the CR3 domain of the E7 oncoprotein as a candidate recognition element for a biosensor. *Hotspot* regions on E7 were determined through residue conservation analysis using ConSurf, with residue R19 as the *anchor*. The *binder* was designed using RFdiffusion and ProteinMPNN, then validated for complex structure using AlphaFold3, for *binding* affinity using PRODIGY, and for solubility through *surface charge* and isoelectric point estimation. The designed *binder* is a 35-residue  $\alpha$ -helical chain that forms a stable complex with E7, indicated by ipTM values of 0.84 (monomer) and 0.80 (dimer). Affinity prediction yielded a dissociation constant ( $K_d$ ) of 56 nM in the dimeric conformation, while solubility estimation showed a *surface charge* of  $-3.00$  e and an isoelectric point of 3.90, indicating good solubility. These results suggest that the designed *binder* has potential for development as a recognition element for cervical cancer biomarker detection.

Keywords: AlphaFold3, cervical cancer, E7 oncoprotein, protein scaffold, ProteinMPNN



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.*

# **DESAIN PROTEIN SCAFFOLD SINTETIK BERBASIS PROTEINMPNN UNTUK DETEKSI BIOMARKER KANKER SERVIKS**

**SAMUEL GERALDY**

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. dr. Husnawati, S.Ked., M.Si.
- 2 Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si., M.Si.

Judul Skripsi : Desain Protein Scaffold Sintetik Berbasis ProteinMPNN untuk  
Deteksi Biomarker Kanker Serviks

Nama : Samuel Geraldly

NIM : G84190059

Disetujui oleh

Pembimbing 1:  
Dr. Inda Setyawati, S.T.P, M.Si.



Pembimbing 2:  
Keni Vidilaseris, PhD.



Diketahui oleh

Ketua Departemen Biokimia  
Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si., M.Si.  
19770915 200501 2 002



Tanggal Ujian:  
23 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.

Perpustakaan IPB University

## PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga skripsi dengan judul “Desain Protein *Scaffold* Sintetik Berbasis ProteinMPNN untuk Deteksi Biomarker Kanker Serviks” berhasil diselesaikan. Penelitian yang dilaksanakan sejak bulan September 2025 sampai November 2025 ini mengangkat tema perancangan protein *scaffold* sintetik secara *in silico* sebagai elemen pengenalan biomarker kanker serviks.

Terima kasih penulis ucapkan kepada Dr. Inda Setyawati, S.TP, M.Si selaku dosen pembimbing pertama dan Keni Vidilaseris, PhD. selaku dosen pembimbing kedua atas segala bimbingan, dukungan, dan saran yang diberikan selama penelitian dan penulisan skripsi ini. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada Ketua Departemen Biokimia, dosen pembimbing akademik, moderator seminar, serta dosen penguji atas masukan yang membangun. Penghargaan penulis sampaikan pula kepada seluruh staf dan civitas akademika Departemen Biokimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Pertanian Bogor.

Ungkapan terima kasih yang sebesar-besarnya penulis sampaikan kepada ibu penulis, Leddy Sisca Lontaan, serta seluruh keluarga dan teman atas doa, dukungan, dan kasih sayang yang diberikan, baik secara langsung maupun tidak langsung. Terima kasih juga penulis sampaikan kepada penghuni indekos Aktibet yang terus mendukung penulis untuk menjadi individu yang skeptis, kritis, dan penasaran dalam segala hal, serta kepada grup Bedugul dan grup Payung dari Apple Developer Academy @BINUS Bali yang senantiasa mendorong (dan memaksa) penulis untuk menamatkan masa studi.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih memiliki kekurangan sehingga saran dan kritik yang membangun sangat diharapkan. Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bali, Agustus 2026

*Samuel Gerald*



@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

## DAFTAR ISI

|                                                              |    |
|--------------------------------------------------------------|----|
| DAFTAR TABEL                                                 | x  |
| DAFTAR GAMBAR                                                | x  |
| DAFTAR LAMPIRAN                                              | x  |
| I PENDAHULUAN                                                | 1  |
| 1.1 Latar Belakang                                           | 1  |
| 1.2 Rumusan Masalah                                          | 2  |
| 1.3 Tujuan Penelitian                                        | 2  |
| 1.4 Manfaat Penelitian                                       | 2  |
| 1.5 Hipotesis                                                | 2  |
| II TINJAUAN PUSTAKA                                          | 3  |
| 2.1 Kanker Serviks                                           | 3  |
| 2.2 Biomarker Onkoprotein E7                                 | 3  |
| 2.3 Protein Scaffold                                         | 4  |
| III METODE PENELITIAN                                        | 6  |
| 3.1 Waktu dan Tempat Penelitian                              | 6  |
| 3.2 Alat dan Bahan                                           | 6  |
| 3.3 Prosedur Kerja                                           | 6  |
| 3.4 Analisis Data                                            | 8  |
| IV HASIL                                                     | 9  |
| 4.1 Tingkat Konservasi CR3 dan Daerah Target Kandidat Binder | 9  |
| 4.2 Kandidat Binder Hasil Desain RFDiffusion dan ProteinMPNN | 11 |
| 4.3 Profil Putatif Fisikokimia Kandidat Binder               | 13 |
| V PEMBAHASAN                                                 | 15 |
| VI SIMPULAN DAN SARAN                                        | 18 |
| 6.1 Simpulan                                                 | 18 |
| 6.2 Saran                                                    | 18 |
| DAFTAR PUSTAKA                                               | 19 |
| LAMPIRAN                                                     | 23 |
| RIWAYAT HIDUP                                                | 35 |

## DAFTAR TABEL

|   |                                                                                                                    |        |
|---|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| 1 | Residu kunci pada domain CR3 E7 dengan skor konservasi $\geq$ berdasarkan analisis ConSurf                         | 8<br>9 |
| 2 | Nilai ipTM dan pTM kompleks E7– <i>binder</i> pada kondisi monomer dan dimer untuk sepuluh kandidat binder terbaik | 11     |
| 3 | Analisis kontak interface antara <i>binder</i> dan E7                                                              | 14     |
| 4 | Profil putatif fisikokimia kandidat <i>binder</i>                                                                  | 14     |

## DAFTAR GAMBAR

|   |                                                                                    |    |
|---|------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1 | Pemetaan skor konservasi ConSurf pada struktur h omodimer domain CR3 E7 (PDB 2B9D) | 10 |
| 2 | Visualisasi close-up $\alpha$ 2-heliks domain CR3 E7                               | 11 |
| 3 | Struktur kompleks E7 monomer– <i>binder</i> hasil prediksi AlphaFold3              | 13 |
| 4 | Struktur kompleks E7 dimer– <i>binder</i> hasil prediksi AlphaFold3                | 13 |

## DAFTAR LAMPIRAN

|   |                                                                                                                              |    |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1 | Bagan Alir Penelitian                                                                                                        | 23 |
| 2 | Skor konservasi per residu pada domain CR3 E7                                                                                | 24 |
| 3 | Daftar lengkap percobaan desain dan validasi kandidat binder terhadap E7 (nilai ipTM dan pTM pada kondisi monomer dan dimer) | 27 |