



# **ANALISIS *IN SILICO* SENYAWA AKTIF TANAMAN KETEPENG CINA (*Cassia alata*) SEBAGAI KANDIDAT ANTI-CANDIDA**

**DINA MUTIARA ESHA**



**PROGRAM STUDI SARJANA KEDOKTERAN HEWAN  
SEKOLAH KEDOKTERAN HEWAN DAN BIOMEDIS  
INSTITUT PERTANIAN BOGOR  
BOGOR  
2024**



### @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 “Analisis *In Silico* Senyawa Aktif Tanaman Ketepeng Cina (*Cassia alata*) sebagai Kandidat Anti-*Candida*” 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 2024

Dina Mutiara Esha  
NIM B0401201103



### *@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

DINA MUTIARA ESHA. Analisis *In Silico* Senyawa Aktif Tanaman Ketepeng Cina (*Cassia alata*) sebagai Kandidat Anti-*Candida*. Dibimbing oleh RINI MADYASTUTI PURWONO dan WASMEN MANALU.

Penelitian ini mengevaluasi potensi senyawa aktif dari tanaman ketepeng cina (*Cassia alata*) sebagai kandidat obat anti-*candida* menggunakan pendekatan *in silico*. Studi ini bertujuan mengidentifikasi dan menganalisis interaksi senyawa aktif asal ekstrak tanaman ketepeng cina dan menginteraksikannya dengan enzim lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase, yang merupakan target utama dalam terapi infeksi *candidiasis*. Metode yang digunakan meliputi penambatan molekuler (*molecular docking*) untuk menentukan afinitas dan stabilitas interaksi ligan dengan reseptor. Hasil menunjukkan bahwa senyawa stigmasterol berpotensi sebagai inhibitor enzim lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase. Stigmasterol mampu berinteraksi dengan sisi aktif Tyr126 pada reseptor dengan nilai energi afinitas yang lebih negatif dibandingkan dengan gentian violet sebagai ligan pembanding.

Kata kunci: anti-*candida*, *cassia alata*, *in silico*, ketepeng cina, lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase

## ABSTRACT

DINA MUTIARA ESHA. *In silico* Analysis of Active Compounds in Ketepeng Cina Plant (*Cassia alata*) as an Anti-*Candida* Candidate. Supervised by RINI MADYASTUTI PURWONO and WASMEN MANALU.

*This study evaluates the potential of active compounds from the ketepeng cina (Cassia alata) plant as an anti-candida drug candidates using an in silico approach. The study aims to identify and analyze the interactions of active compounds from ketepeng cina extract and the enzyme lanosterol 14 $\alpha$ -demethylase, a primary target in candidiasis therapy. The methods used include molecular docking to determine the affinity and stability of ligand-receptor interactions. The results indicate that stigmasterol compound has potential as inhibitor of the lanosterol 14 $\alpha$ -demethylase enzyme. Stigmasterol can interact with the active site Tyr126 on the receptor with more negative affinity energy values compared to gentian violet as the reference ligand.*

*Keywords: anti-candida, cassia alata, in silico, ketepeng cina, lanosterol 14 $\alpha$ -demethylase*

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 milik IPB, tahun 2024  
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.*

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.

**ANALISIS *IN SILICO* SENYAWA AKTIF TANAMAN  
KETEPENG CINA (*Cassia alata*) SEBAGAI  
KANDIDAT ANTI-*CANDIDA***

**DINA MUTIARA ESHA**

Skripsi  
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana pada  
Sekolah Kedokteran Hewan dan Biomedis

**PROGRAM STUDI SARJANA KEDOKTERAN HEWAN  
SEKOLAH KEDOKTERAN HEWAN DAN BIOMEDIS  
INSTITUT PERTANIAN BOGOR  
BOGOR  
2024**



@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. Rini Madyastuti Purwono, S.Si., Apt., M.Si
- 2 Prof. Dr. Ir. Wasmen Manalu
- 3 Drs. Pudji Achmadi, M.Si
- 4 Dr. drh. Herwin Pisestyani, M.Si





Judul Skripsi : Analisis *In Silico* Senyawa Aktif Tanaman Ketepeng Cina (*Cassia alata*) sebagai Kandidat Anti-*Candida*

Nama : Dina Mutiara Esha  
NIM : B0401201103

Disetujui oleh

Pembimbing 1:  
Dr. Rini Madyastuti Purwono, S.Si., Apt., M.Si



Pembimbing 2:  
Prof. Dr. Ir. Wasmen Manalu



Diketahui oleh

Ketua Program Studi Kedokteran Hewan  
Dr. drh. Wahono Esthi Prasetyaningtyas, M.Si.  
NIP 198006182006042026



Wakil Dekan Bidang Akademik dan Kemahasiswaan  
Sekolah Kedokteran Hewan dan Biomedis  
Prof. drh. Ni Wayan Kurniani Karja, MP, Ph.D  
NIP 196902071996012001



Tanggal Ujian:  
10 Juli 2024

Tanggal Lulus: 15 JUL 2024

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*

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 Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Desember 2023 sampai bulan Maret 2024 ini ialah potensi ekstrak tanaman ketepeng cina, dengan judul “Analisis *In Silico* Senyawa Aktif Tanaman Ketepeng Cina (*Cassia alata*) sebagai Kandidat Anti-*Candida*”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr. Rini Madyastuti Purwono, S.Si., Apt., M.Si selaku dosen pembimbing pertama dan Prof. Dr. Ir. Wasmen Manalu selaku dosen pembimbing kedua sekaligus dosen penggerak yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing akademik, moderator seminar, dan penguji luar komisi pembimbing.

Penghargaan penulis sampaikan kepada Ibu Rini Kurniasih S.Si., M.Si yang telah memberikan ilmunya mengenai *in silico*, staf Laboratorium Farmasi Sekolah Kedokteran Hewan dan Biomedis IPB University, serta rekan satu bimbingan penulis yang telah banyak membantu selama pengumpulan data.

Ungkapan terima kasih juga disampaikan kepada almarhum Papa, almarhumah Mama, serta seluruh keluarga terdekat penulis yang telah memberikan dukungan, doa, kasih sayang, dan materi selama di perantauan. Penulis juga merasa bersyukur dengan adanya sahabat penulis, terutama Fauzan Tiko Arasy, yang selalu menemani penulis di masa-masa yang sulit.

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

Bogor, Juli 2024

*Dina Mutiara Esha*



### *@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 ISI

DAFTAR ISI	ix
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	2
1.4 Manfaat	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 <i>Candidiasis</i> pada Unggas	3
2.2 Enzim Lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase	3
2.3 Tanaman Ketepeng Cina ( <i>Cassia alata</i> )	4
2.4 Uji <i>In Silico</i>	5
III METODE	7
3.1 Waktu dan Tempat	7
3.2 Alat dan Bahan	7
3.3 Prosedur Kerja	8
3.3.1 Persiapan Protein Reseptor dan Ligan	8
3.3.2 Prediksi Struktur Protein	8
3.3.3 Analisis Stabilitas dan Toksisitas Ligan	9
3.3.4 Validasi Metode Penambatan Molekuler	9
3.3.5 Penambatan Molekuler	9
3.3.6 Penyaringan Virtual dengan PyRx	10
3.3.7 Visualisasi Interaksi Reseptor-Ligan	10
3.3.8 Analisis Energi Afinitas, Konstanta Inhibisi, dan Ikatan Kimia	10
3.4 Analisis Data	10
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	11
4.1 Struktur dan Stabilitas Reseptor	11
4.2 Struktur dan Stabilitas Ligan	13
4.3 Toksisitas Ligan	15
4.4 Validasi Metode Penambatan Molekuler	16
4.5 Hasil Penambatan Molekuler	17
4.6 Analisis Interaksi Ligan-Reseptor	18
V SIMPULAN DAN SARAN	27
5.1 Simpulan	27
5.2 Saran	27
DAFTAR PUSTAKA	28
LAMPIRAN	34
RIWAYAT HIDUP	37



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	Analisis Data plot Ramachandran pada reseptor 5HS1	12
2	Hasil analisis stabilitas gentian violet dan ligan uji dari senyawa aktif ekstrak tanaman ketepeng cina ( <i>Cassia alata</i> ) dengan aturan Lipinski	14
3	Hasil analisis toksisitas oral akut dan tingkat karsinogen ligan pembanding (gentian violet) dan ligan uji dari senyawa aktif ekstrak tanaman ketepeng cina ( <i>Cassia alata</i> )	15
4	Hasil penambatan molekuler gentian violet dan ligan uji dari senyawa aktif ekstrak tanaman ketepeng cina ( <i>Cassia alata</i> ) terhadap enzim lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase	17
5	Hasil interaksi residu asam amino gentian violet dan ligan uji dari senyawa aktif ekstrak tanaman ketepeng cina ( <i>Cassia alata</i> ) terhadap enzim lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase	18
6	Nilai energi afinitas dan persebaran ikatan residu asam amino	26

## DAFTAR GAMBAR

1	Lesi pseudomembran di esofagus, faring, dan laring (panah putih) pada ayam (Mugale <i>et al.</i> 2015).	3
2	Struktur kristal enzim lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase (CYP51) terkompleksasi dengan <i>voriconazole</i> (PDB 2016).	4
3	Tanaman ketepeng cina (Yon <i>et al.</i> 2022)	4
4	Struktur 3D ligan alami <i>voriconazole</i> (a), stigmasterol (b), astragalin (c), rhein (d), <i>chrysophanic acid</i> (e), kaempferol (f), dan gentian violet (g)	8
5	Struktur 3D enzim lanosterol 14 $\alpha$ -demetilase sebelum (kiri) dan sesudah dipreparasi (kanan)	12
6	Hasil plot Ramachandran pada reseptor 5HS1	12
7	Gambar <i>superimpose</i> antara ligan alami sebelum penambatan molekuler (hijau) dan setelah <i>redocking</i> (magenta).	16
8	Visualisasi ikatan ligan alami <i>voriconazole</i> dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	19
9	Visualisasi ikatan ligan uji stigmasterol dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	20
10	Visualisasi ikatan ligan uji astragalin dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	21
11	Visualisasi ikatan ligan uji rhein dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	22
12	Visualisasi ikatan ligan uji <i>chrysophanic acid</i> dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	23
13	Visualisasi ikatan ligan uji kaempferol dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	24
14	Visualisasi ikatan ligan pembanding gentian violet dan reseptor; (a) 2D; (b) 3D	25

## DAFTAR LAMPIRAN

1	Hasil penambatan ligan alami	35
2	Contoh perhitungan nilai konstanta inhibisi ligan uji rhein	36