



STABILITAS INTERAKSI SENYAWAAN FLAVONOID ASAM JAWA DAN MONOAMINA OKSIDASE A BERPOTENSI SEBAGAI ANTIDEPRESAN MELALUI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

ZAHRA SAFIRA AS



**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Stabilitas Interaksi Senyawaan Flavonoid Asam Jawa dan Monoamina Oksidase A Berpotensi sebagai Antidepresan melalui Simulasi Dinamika Molekuler” 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 2025

Zahra Safira AS
G4401211029

ABSTRAK

ZAHRA SAFIRA AS. Stabilitas Interaksi Senyawaan Flavonoid Asam Jawa dan Monoamina Oksidase A Berpotensi sebagai Antidepresan melalui Simulasi Dinamika Molekuler. Dibimbing oleh TRIVADILA dan SETYANTO TRI WAHYUDI.

Depresi merupakan gangguan suasana hati yang berhubungan dengan aktivitas enzim MAO-A. Senyawa aktif berupa flavonoid dari tanaman asam jawa diduga memiliki potensi antidepresan, tetapi interaksinya dengan MAO-A masih perlu divalidasi. Penelitian ini bertujuan mengevaluasi stabilitas interaksi lima senyawa aktif asam jawa yaitu apigenin, kaempferol, luteolin, morin, dan kuersetin—dengan enzim MAO-A melalui simulasi dinamika molekuler selama 200 ns menggunakan perangkat lunak Amber. Analisis dilakukan berdasarkan parameter RMSD, RMSF, radius girasi, ikatan hidrogen, total energi, jarak, dan MMGBSA. Hasilnya menunjukkan bahwa semua senyawa tetap berada dalam situs aktif sepanjang simulasi. Kompleks apigenin–MAO-A memiliki nilai MMGBSA paling negatif dan interaksi hidrogen dominan dengan residu Asn170 mengindikasikan afinitas dan kestabilan tinggi. Temuan ini menguatkan potensi apigenin sebagai kandidat inhibitor MAO-A berbasis fitofarmaka dan mendukung peran flavonoid asam jawa sebagai agen antidepresan alami.

Kata kunci: antidepresan, asam jawa, flavonoid, MAO, dinamika molekuler

ABSTRACT

ZAHRA SAFIRA AS. Stability of *Tamarindus indica* Flavonoids Interaction with Monoamine Oxidase A as Potential Antidepressants through Molecular Dynamics Simulation. Supervised by TRIVADILA and SETYANTO TRI WAHYUDI.

Depression is a mood disorder associated with the activity of the MAO-A enzyme. Active compounds in the form of flavonoids from tamarind are suspected to have antidepressant potential, but their interaction with MAO-A need to be validated. This study aimed to evaluate the interaction stability of five *T. indica*-derived flavonoid compounds—apigenin, kaempferol, luteolin, morin, and quercetin—with MAO-A using molecular dynamics simulation for 200 ns using Amber software. The analysis was based on RMSD, RMSF, radius of gyration, hydrogen bonding, total energy, distance, and MMGBSA parameters. The results showed that all compounds remained within the active site throughout the simulation. The apigenin–MAO-A complex exhibited the most negative MMGBSA value and dominant hydrogen bonding with Asn170, indicating high affinity and stability. These findings support the potential of apigenin as a phyto-based MAO-A inhibitor and reinforce the role of tamarind flavonoids as natural antidepressant agents.

Keywords: antidepressant, flavonoid, MAO-A, molecular dynamics, *tamarindus indica*



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 2025
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.

**STABILITAS INTERAKSI SENYAWAAN FLAVONOID ASAM
JAWA DAN MONOAMINA OKSIDASE A BERPOTENSI SEBAGAI
ANTIDEPRESAN MELALUI SIMULASI DINAMIKA
MOLEKULER**

ZAHRA SAFIRA AS

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Kimia

**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



- 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. Zaenal Abidin, S.Si., M.Agr.
- 2 Novriyandi Hanif, S.Si., M.Sc., D.Sc.
- 3 Prof. Dr. Dra. Eti Rohaeti, M.Si.



Judul Skripsi : Stabilitas Interaksi Senyawaan Flavonoid Asam Jawa dan Monoamina Oksidase A Berpotensi sebagai Antidepresan melalui Simulasi Dinamika Molekuler

Nama : Zahra Safira AS
NIM : G4401211029

Hak Cipta milik IPB University

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Trivadila, S.Si., M.Si., Ph.D.

Pembimbing 2:
Dr. Setyanto Tri Wahyudi, M.Si.

Diketahui oleh

Ketua Departemen Kimia:
Prof. Dr. Dra. Dyah Iswantini Pradono, M.Sc.Agr.
NIP. 198401232015042001

Tanggal Ujian: 30 Juni 2025

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 :

- Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- 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 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 Januari 2025 sampai bulan Mei 2025 ini ialah evaluasi stabilitas interaksi senyawa alami sebagai inhibitor enzim dalam pengembangan agen antidepresan, dengan judul “Stabilitas Interaksi Senyawaan Flavonoid Asam Jawa dan Monoamina Oksidase A Berpotensi sebagai Antidepresan melalui Simulasi Dinamika Molekuler”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada Trivadila, S.Si., M.Si., Ph.D. selaku pembimbing pertama dan Dr. Setyanto Tri Wahyudi, M.Si. selaku pembimbing kedua atas bimbingan, dukungan, saran, dan masukan pada penelitian dan penulisan karya ilmiah ini. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada Bapak, Ibu, Kakak, serta seluruh keluarga yang telah memberi dukungan, doa, dan kasih sayangnya. Terima kasih kepada seluruh teman-teman yang tidak bisa penulis sebutkan yang telah memberikan dukungan sehingga penulis mampu menyelesaikan karya ilmiah ini dengan baik.

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

Bogor, Juli 2025

Zahra Safira AS



- 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	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	3
II METODE	4
2.1 Waktu dan Tempat	4
2.2 Alat dan Bahan	4
2.3 Prosedur Kerja	4
III HASIL DAN PEMBAHASAN	6
3.1 Reseptor Protein dan Ligan Uji	6
3.2 Preparasi Reseptor	8
3.3 Parameterisasi Ligan dan Kofaktor	8
3.4 Analisis Trajektori	9
IV SIMPULAN DAN SARANAN	28
4.1 Simpulan	28
4.2 Saran	28
DAFTAR PUSTAKA	29
LAMPIRAN	34
RIWAYAT HIDUP	42



DAFTAR TABEL

3.1	Nilai energi ikat hasil evaluasi menggunakan Prodigy	7
3.2	Rerata RMSD global kompleks reseptor dengan masing-masing ligan	13
3.3	Daftar ikatan hidrogen dominan antara reseptor dengan ligan selama simulasi	18
3.4	Nilai MMGBSA reseptor dengan masing-masing ligan	23

DAFTAR GAMBAR

3.1	Pose ligan harmin (a) dengan FAD (b) terbaik dari piranti lunak Vina	6
3.2	Plot RMSD kompleks MAO-A, protein, dan ligan terhadap waktu untuk masing-masing ligan: (a) harmin, (b) apigenin, (c) luteolin, (d) morin, (e) kuersetin, dan (f) kaempferol	10
3.3	Cuplikan struktur kompleks reseptor dengan ligan harmin (a), apigenin (b), luteolin (c), morin (d), kuersetin (e), dan kaempferol (f) selama simulasi per 500 <i>frame</i> dengan ekor reseptor (lingkaran merah)	11
3.4	Plot RMSD terhadap waktu antara reseptor tanpa ekor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c)	12
3.5	Plot RMSD terhadap waktu antara reseptor tanpa ekor dengan morin (a), ligan kuersetin (b), dan ligan kaempferol (c)	13
3.6	Plot RMSF terhadap waktu antara reseptor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c), ligan morin (d), ligan kuersetin (e), dan ligan kaempferol (f)	14
3.7	Radius girasi terhadap waktu antara reseptor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c), ligan morin (d), ligan kuersetin (e), dan ligan kaempferol (f)	16
3.8	Radius girasi terhadap waktu antara reseptor tanpa ekor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c), ligan morin (d), ligan kuersetin (e), dan ligan kaempferol (f)	17
3.9	Visualisasi ikatan hidrogen berdasarkan kode atom hasil simulasi dinamika molekuler	19
3.10	Struktur asparagina	20
3.11	Ikatan hidrogen antara asparagina dengan ligan harmin	20
3.12	<i>Heatmap</i> ikatan hidrogen kompleks reseptor dengan harmin	21
3.13	Plot total energi terhadap waktu antara reseptor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c), ligan morin (d), ligan kuersetin (e), dan ligan kaempferol (f)	22
3.14	Grafik MMGBSA terhadap waktu antara reseptor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c), ligan morin (d), ligan kuersetin (e), dan ligan kaempferol (f)	25
3.15	Plot jarak terhadap waktu antara reseptor dengan ligan harmin (a), ligan apigenin (b), ligan luteolin (c), ligan morin (d), ligan kuersetin (e), dan ligan kaempferol (f)	26

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram alir penelitian	35
2	Mekanisme reaksi oksidatif enzim MAO-A	36
3	Pose ligan terbaik setiap piranti lunak	36
4	Visualisasi ikatan hidrogen antara asparagina dengan ligan	39
5	Ringkasan ikatan hidrogen signifikan antar ligan dan residu	40
6	<i>Heatmap</i> ikatan hidrogen kompleks reseptor dengan ligan	40
7	Struktur kimia ligan	41

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.