

**Studi Penambatan Molekul Senyawa Buah Jernang
(*Daemonorops draco*) terhadap Enzim α -glukosidase**

Skripsi

Diajukan Oleh:

TEUKU BAIHAQI ALAMSYAH

210704003

Mahasiswa Program Studi Kimia

Fakultas Sains dan Teknologi UIN Ar-Raniry



**FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI AR-RANIRY
BANDA ACEH
2025 M/ 1446 H**

LEMBAR PERSETUJUAN SKRIPSI

Studi Penambatan Molekul Senyawa Buah Jernang (*Daemonorops draco*) Terhadap Enzim α -glukosidase

Skripsi

Diajukan kepada Fakultas Sains dan Teknologi UIN Banda Aceh
Sebagai Salah Satu Persyaratan Penulisan Tugas Skripsi
dalam Prodi Kimia

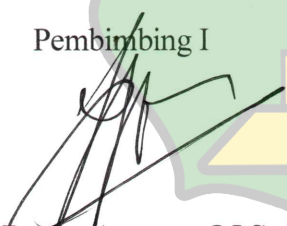
Oleh :

TEUKU BAIHAQI ALAMSYAH
NIM. 210704003
Mahasiswa Fakultas Sains dan Teknologi
Program Studi Kimia

Disetujui Untuk Diseminarkan Oleh :

Pembimbing I

Pembimbing II


Anjar Purba Asmara, M.Sc., Ph.D.
NIDN. 2009099501


MUSLEM, S.Si., M.Sc
NIDN. 2006069004

Ketua Program Studi,


Muhammad Ridwan Harahap, M.Si
NIDN. 2027118603

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

**Studi Penambatan Molekul Senyawa Buah Jernang
(*Daemonorops draco*) terhadap Enzim α -glukosidase**

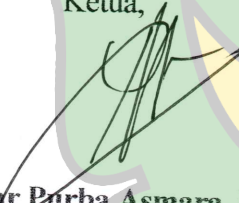
TUGAS AKHIR/SKRIPSI

Telah Diuji Oleh Panitia Ujian Munaqasah Tugas Akhir/Skripsi Fakultas Sains dan Teknologi UIN Ar-Raniry Banda Aceh dan Dinyatakan Lulus Serta Diterima Sebagai Salah Satu Beban Studi Program Sarjana (S-1) Dalam Ilmu/Prodi KIMIA

Pada Hari/Tanggal: rabu, 24 Juli 2025 29 Muharram 1447 H di Darussalam,
Banda Aceh

Panitia Ujian Munaqasah Tugas Akhir/Skripsi:

Ketua,


Anjar Purba Asmara, M.Sc., Ph.D.
NIDN. 2009099501

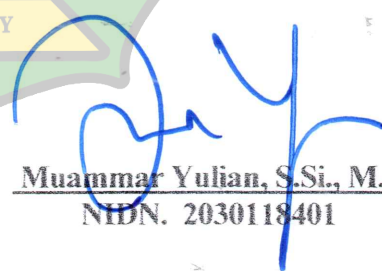
Sekretaris,


MUSLEM, S.Si., M.Sc
NIDN. 2006069004

penguji I,


Bhayu Gita Bherpama, S.Si, M.Si
NIDN. 2023018901

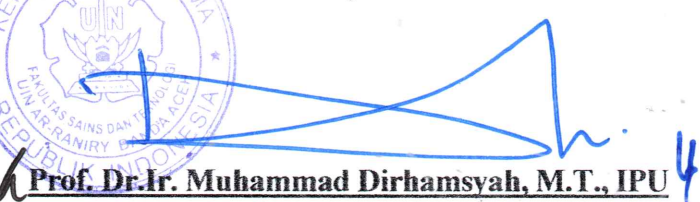
penguji II


Muammar Yulian, S.Si., M.Si
NIDN. 2030118401

Mengetahui:

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Ar-Raniry Banda Aceh,




Prof. Dr. Ir. Muhammad Dirhamsyah, M.T., IPU
NIDN. 2027118603

LEMBAR PENYATAAN KEASLIAN TUGAS AKHIR/SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah:

Nama : Teuku Baihaqi Alamsyah
NIM : 210704003
Program Studi : KIMIA
Fakultas : SAINS DAN TEKNOLOGI
Judul : Studi Penambatan Molekul Senyawa Buah Jernang
(*Daemonorops draco*) terhadap Enzim α -glukosidase

Dengan ini menyatakan bahwa dalam penulisan tugas akhir/skripsi ini, saya:

1. Tidak menggunakan ide orang lain tanpa mampu mengembangkan dan mempertanggungjawabkan;
2. Tidak melakukan plagiasi terhadap naskah karya orang lain;
3. Tidak menggunakan karya orang lain tanpa menyebut sumber asli atau tanpa izin pemilik karya;
4. Tidak memanipulasi dan memalsukan data;
5. Mengerjakan sendiri karya ini dan mampu bertanggungjawab atas karya ini.

Bila dikemudian hari ada tuntutan dari pihak lain atas karya saya dan telah melalui pembuktian yang dapat dipertanggungjawabkan dan ternyata memang ditemukan bukti bahwa saya telah melanggar pernyataan ini, maka saya siap dikenai sanksi berdasarkan aturan yang berlaku di Fakultas Sains dan Teknologi UIN Ar-Raniry Banda Aceh.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya dan tanpa paksaan dari pihak manapun.

Banda Aceh, 21 Juli 2025



Teuku Baihaqi Alamsyah

Abstrak

Nama : Teuku Baihaqi Alamsyah
NIM : 210704003
Program Studi : Kimia
Judul : Studi Penambatan Molekul Senyawa Buah
Jernang (*Daemonorops draco*) terhadap Enzim α -
glukosidase
Tanggal Sidang : 23 Juli 2025
Jumlah Halaman : 73
Pembimbing I : Anjar Purba Asmara, M.Sc., Ph.D.
Pembimbing II : Muslem, S.Si., M.Sc.
Kata Kunci : Penambatan molekul, Enzim α -glukosidase,
Daemonorops draco, Flavonoid, Antidiabetes, Enzim,
Inhibitor enzim

penelitian ini didasarkan pada meningkatnya prevalensi diabetes melitus tipe 2 dan perlunya alternatif terapi dengan efek samping yang dapat di minimalisir. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa bioaktif dari *Dracaena angustifolia* sebagai penghambat enzim α -glukosidase melalui pendekatan *in silico*. Uji dilakukan menggunakan metode penambatan molekul (*molecular docking*) terhadap struktur kristal α -glukosidase, dengan ligan pembanding acarbose sebagai inhibitor standar. Analisis interaksi mencakup afinitas ikatan, residu asam amino aktif, serta jenis ikatan yang terbentuk. Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa senyawa uji memiliki afinitas yang lebih kuat dibandingkan acarbose, dengan interaksi dominan pada residu katalitik Asp214, Glu276, dan Asp349, serta melibatkan ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik yang mendukung kestabilan kompleks. Temuan ini mengindikasikan bahwa senyawa dari *D. angustifolia* berpotensi sebagai kandidat inhibitor α -glukosidase yang efektif.

Abstract

Name : Teuku Baihaqi Alamsyah
NIM : 210704003
Study Program : Chemistry
Title : *Molecular Docking Study of Jernang Fruit (Daemonorops draco) Compounds against the α -Glucosidase Enzyme*
Thesis defense date : July 23 2025
Number of page : 73
Supervisor I : Anjar Purba Asmara, M.Sc., Ph.D.
Supervisor II : Muslem, S.Si., M.Sc.
Keyword : *Molecular docking, α -Glucosidase enzyme, Daemonorops draco, Flavonoid, Antidiabetic, Enzyme, Enzyme inhibitor*

The research is based on the increasing prevalence of type 2 diabetes mellitus and the need for alternative therapies which can be minimized the side effects. This study aims to evaluate the potential of bioactive compounds from Dracaena angustifolia as α -glucosidase inhibitors through an in silico approach. The assessment was carried out using molecular docking against the crystal structure of α -glucosidase, with acarbose as the standard reference inhibitor. Interaction analyses included binding affinity, active amino acid residues, and the types of bonds formed. The results showed that several tested compounds exhibited stronger binding affinities compared to acarbose, with dominant interactions involving catalytic residues Asp214, Glu276, and Asp349, as well as hydrogen bonds and hydrophobic interactions that contribute to complex stability. These findings suggest that compounds from D. angustifolia have potential as effective α -glucosidase inhibitors.

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah Subahanahu Wata'ala yang telah menganugerahkan Al-Quran sebagai hudan lin nass (petunjuk bagi seluruh manusia) dan rahmatan lil'alam (rahmat bagi segenap alam). Sehingga penulis dapat menyelesaikan tugas akhir penelitian ini. Shalawat dan salam semoga tercurahkan kepada junjungan Nabi Besar Muhammad Saw beserta keluarga, para sahabat dan seluruh umatnya yang selalu istiqomah hingga akhir zaman. Dalam kesempatan ini penulis mengambil judul skripsi "Studi Penambatan Molekul Senyawa Buah Jernang (*Daemonorops draco*) terhadap Enzim α -glukosidase". Penulisan skripsi bertujuan untuk melengkapi tugas-tugas dan memenuhi syarat-syarat untuk menyelesaikan pendidikan pada Universitas Islam Negeri Ar-Raniry Banda Aceh.

Penulis mengucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada semua pihak yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan skripsi penelitian ini, terutama kepada orang tua dan keluarga yang telah memberikan dukungan dan untaian doa nya selama ini. Penulis juga mendapatkan banyak pengetahuan dan wawasan baru yang sangat berarti. Oleh karena itu, penulis tidak lupa mengucapkan terimakasih kepada:

1. Bapak Prof. Dr. Ir. Muhammad Dirhamsyah, MT., IPU., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Ar-Raniry Banda Aceh.
2. Bapak Muhammad Ridwan Harahap, M.Si selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Ar-Raniry Banda Aceh.
3. Dr. Khairun Nisah, S.T., M.Sc. sebagai pembimbing akademik
4. Anjar Purba Asmara, M.Sc., Ph.D. sebagai pembimbing I Program Studi Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Ar-Raniry Banda Aceh skripsi penelitian ini.
5. Muslem, S.Si., M.Sc. sebagai pembimbing II dalam Program Studi Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Ar-Raniry Banda

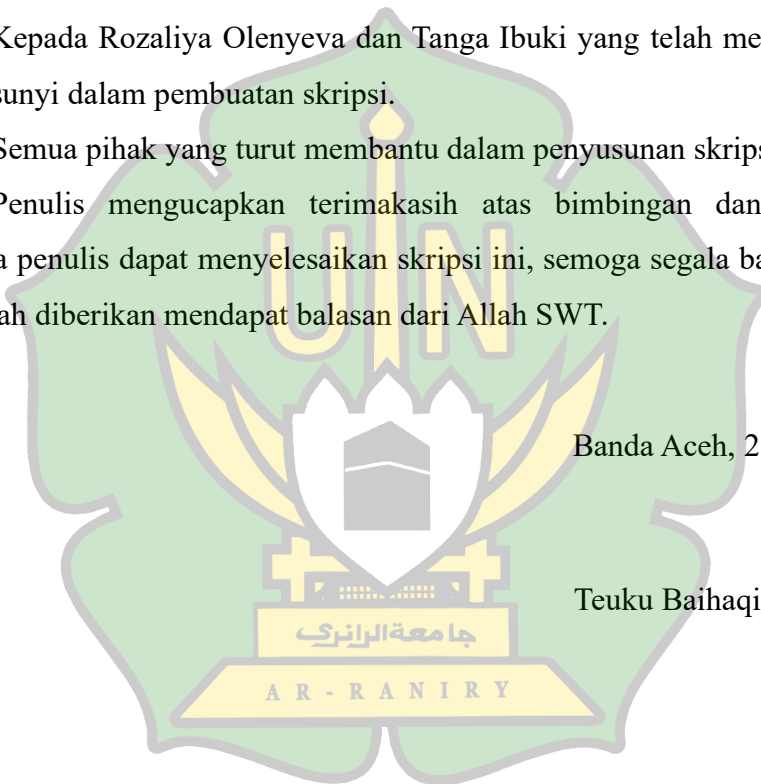
Aceh skripsi penelitian ini.

6. Bhayu Gita Bhernama, M.Si. sebagai penguji I dalam sidang penelitian ini.
7. Muammar Yulian, S.Si., M.Si sebagai penguji II dalam sidang penelitian ini.
8. Seluruh Ibu/Bapak Dosen dan Staf Program Studi Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Ar-Raniry Banda Aceh.
9. Kepada ibunda Iridiani dan ayahanda Ir. H Teuku Syahrizal yang telah membantu dalam segi mental, kasih sayang, dana dan makanan.
10. Kepada saudara kandung yang selalu merepotkan.
11. Kepada Rozaliya Olenyeva dan Tanga Ibuki yang telah menemani malam sunyi dalam pembuatan skripsi.
12. Semua pihak yang turut membantu dalam penyusunan skripsi ini.

Penulis mengucapkan terimakasih atas bimbingan dan dorongannya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini, semoga segala bantuan dan doa yang telah diberikan mendapat balasan dari Allah SWT.

Banda Aceh, 21 juli 2025

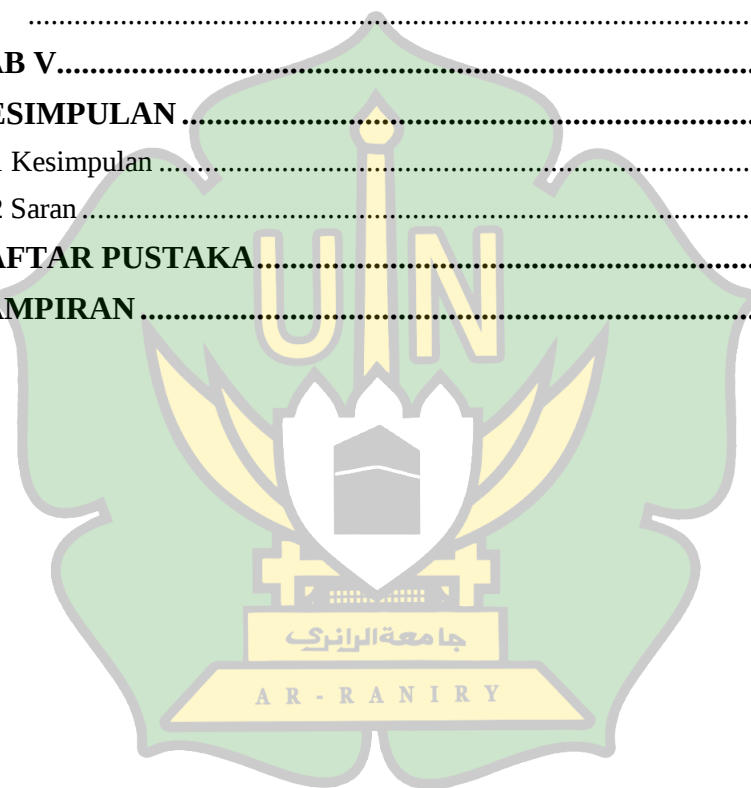
Teuku Baihaqi Alamsyah



DAFTAR ISI

Lembar Persetujuan Skripsi	ii
Lembar pernyataan keaslian tugas akhir/skripsi.....	iii
Abstrak.....	iv
Abstract	v
KATA PENGANTAR.....	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR SINGKATAN.....	xii
BAB I.....	1
PENDAHULUAN	1
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Rumusan Masalah.....	2
I.3. Tujuan Penelitian.....	2
I.4. Batasan Penelitian.....	2
BAB II	4
TINJAUAN PUSTAKA	4
II.1. Pemodelan Komputasi Senyawa.....	4
II.2. Enzim α -Glukosidase.....	5
III.3. Peran Enzim α -Glukosidase Dalam Penyakit Diabetes	6
II.4. Buah Jernang (<i>Daemonorops Draco</i>).....	6
II.5. Penambatan Molekul atau <i>Molecular Docking</i>	25
II.6. Aplikasi Untuk Studi Penambatan Molekul	26
BAB III.....	29
METODE DAN BAHAN	29
III.1 Alat Dan Bahan	29
III.2 Preparasi Struktur Ligan	30
III.3 Preparasi Struktur Enzim	31
III.4 Penambatan Ligan Ke Enzim.....	32
III.5 Visualisasi Hasil Penambatan	35
III.6 Uji Validasi RMSD	36
III.7 Prediksi Sifat <i>Drug-likeness</i> Senyawa.....	37

III.8 Analisis Energi Ikatan.....	37
BAB IV	39
HASIL DAN PEMBAHASAN.....	39
IV.1 Preparasi Struktur Ligan	39
IV.2 Preparasi Struktur Enzim.....	39
IV.3 Penambatan Ligan ke Enzim.....	40
IV.4 Hasil Uji Validasi RMSD	43
IV.5 Visualisasi Hasil Penambatan	44
IV.6 Analisis Kesesuaian Sifat <i>Drug-Likeness</i> Molekul Terhadap Aturan Lipinski	55
BAB V.....	59
KESIMPULAN	59
V.1 Kesimpulan	59
V.2 Saran	59
DAFTAR PUSTAKA.....	60
LAMPIRAN	67

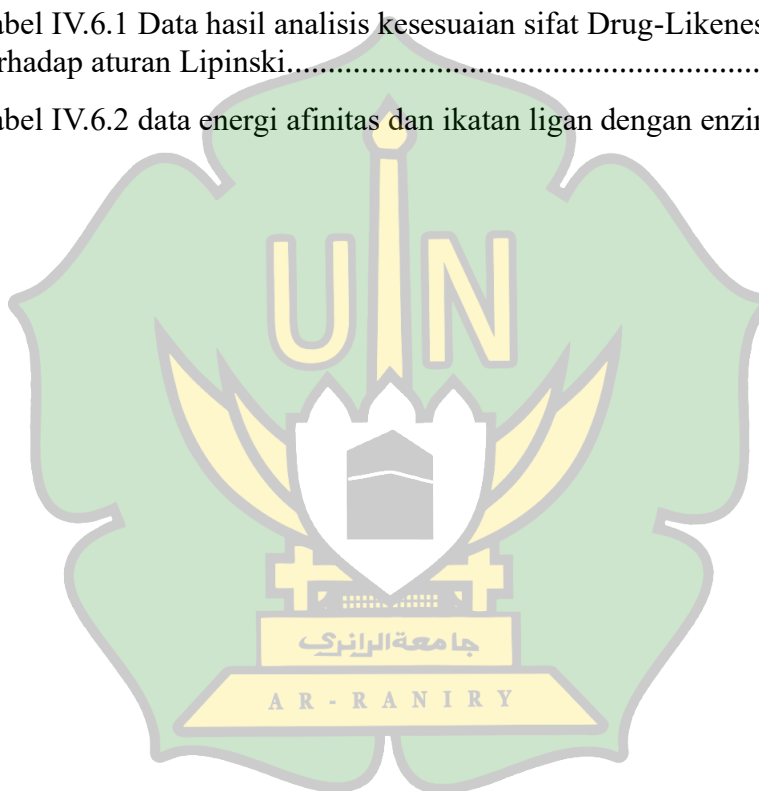


DAFTAR GAMBAR

Gambar II.2.1 Enzim α -glukosidase	5
Gambar II.4.1 Buah jernang (<i>Daemonorops draco</i>)	6
Gambar III.1.1 Website Pubchem.....	28
Gambar III.2.1 Aplikasi Open Babel Gui	29
Gambar III.2.2 Preparasi ligan menggunakan aplikasi Autodock 4.2	30
Gambar III.3.1 Preparasi enzim α -glukosidase menggunakan BIOVIA studio	30
Gambar III.3.2 Preparasi enzim menggunakan Autodock 4.2	31
Gambar III.4.1 Simulasi grid box pada aplikasi Autodock 4.2	32
Gambar III.4.2 Proses docking ligan dan enzim menggunakan aplikasi command prompt dengan program Autodock Vina.....	32
Gambar III.4.3 Hasil running Autodock Vina	33
Gambar III.5.1 Visualisasi hasil docking dengan aplikasi BIOVIA Studio.....	33
Gambar III.5.2 Contoh gambar visual dari 2D	34
Gambar III. Diagram alir penelitian	36
Gambar IV.1.1 Struktur ligan a) sebelum dipreparasi dan b) sesudah dipreparasi	37
Gambar IV.2.1 Penentuan Grid Box	38
Gambar IV.5.1 Visualisasi 2D interaksi antara ligan dengan asam amino enzim	47
Gambar IV.5.2 Domain sisi aktif enzim, domain A (residu 1–113 dan 190–512) warna kuning, domain B (residu 114–189) warna biru dan domain C (residu 513–589) warna merah.....	50

DAFTAR TABEL

Tabel II.4.1 kandungan senyawa buah Jernang	8
Tabel IV.2.1 Penentuan Grid Box	38
Tabel IV.3.1 Hasil Docking	39
Tabel IV.5.1 kesimpulan senyawa sebagai inhibitor	52
Tabel IV.4.1 <i>calculation of reference 3A4A versus all aligned molecules</i> ...	44
Tabel IV.6.1 Data hasil analisis kesesuaian sifat Drug-Likeness molekul terhadap aturan Lipinski	52
Tabel IV.6.2 data energi afinitas dan ikatan ligan dengan enzim	54



DAFTAR SINGKATAN

SINGKATAN	Nama	Pemakaian pertama kali pada halaman
ARG	Arginine	42
ASN	Asparagine	42
ASP	Aspartic Acid	42
CYS	Cysteine	42
GLN	Glutamine	42
GLU	Glutamic	42
GLY	Glycine	42
HBA	Hydrogen Bond Acceptor	42
HBD	Hydrogen Bond Donor	42
HIS	Histidine	42
ILE	Isoleucine	42
LEU	Leucine	42
LYS	Lysin	42
MET	Methionine	42
PDB	Protein Data Bank	30
PDBQT	PDB + Charges + Torsions	30
PHE	Phenylalanine	42
PRO	Proline	42
RMSD	Root Mean Square Deviation	36
SDF	Structure Data File	26
SER	Serine	42
SMILES	Simplified	26
THR	Threonine	42
TRP	Tryptophan	42
TYR	Tyrosine	42
VAL	Valine	42
ΔG	Delta G (Free Binding Energy)	2



BAB I

PENDAHULUAN

I.1. Latar Belakang

Penelitian dalam bidang bioinformatika dan bioteknologi molekuler semakin berkembang dalam mengidentifikasi interaksi antara senyawa bioaktif dengan target-target protein, terutama enzim. Salah satu metode *in silico* yang banyak digunakan dalam studi ini adalah molecular docking, yaitu teknik pemodelan komputer yang digunakan untuk mensimulasikan ikatan antara ligan (senyawa aktif) dan reseptor (biasanya protein atau enzim). Metode ini dapat memberikan gambaran awal mengenai afinitas, mode ikatan, serta residu aktif yang berperan dalam interaksi tersebut, sehingga berguna dalam pemilihan kandidat senyawa inhibitor yang potensial.

Salah satu enzim yang sering menjadi target dalam studi penghambatan adalah α -glukosidase, enzim hidrolase yang berfungsi memecah karbohidrat kompleks menjadi monosakarida di usus halus. Penghambatan aktivitas enzim ini akan memperlambat pemecahan karbohidrat dan penyerapan glukosa, yang dalam banyak studi dijadikan indikator untuk menilai potensi senyawa sebagai agen penghambat metabolisme glukosa (Kashtoh & Baek, 2022).

Dalam pencarian inhibitor alami, buah Jernang (*Daemonorops draco*) menjadi sumber senyawa yang menarik perhatian. Tumbuhan ini tersebar luas di Asia Tenggara, termasuk Indonesia, dan telah lama digunakan dalam pengobatan tradisional. Penelitian menunjukkan bahwa buah Jernang mengandung berbagai senyawa bioaktif yang potensial, seperti proanthosianidin dimerik (Nie dkk., 2023), flavan (Al-Ishaq dkk., 2019), dan 2-arilbenzofuran (Shrestha dkk., 2019). Senyawa-senyawa ini terbukti memiliki aktivitas biologis, termasuk kemampuan menghambat enzim-enzim kunci dalam metabolisme glukosa.

Studi pemodelan molekuler yang memanfaatkan simulasi docking dapat membantu mengevaluasi seberapa kuat interaksi senyawa-senyawa aktif dari buah Jernang dengan enzim α -glukosidase. Analisis ini mencakup identifikasi energi

afinitas ikatan (ΔG), jenis ikatan (hidrogen, hidrofobik, pi-stacking), serta residu aktif yang terlibat dalam pengikatan. Penelitian ini tidak hanya memberikan pemahaman mekanistik mengenai interaksi ligan-enzim, tetapi juga membantu menyaring senyawa kandidat yang dapat dikembangkan lebih lanjut melalui uji eksperimental (Widiasti dkk., 2022).

Dengan pendekatan molekular yang presisi dan berbasis komputasi, studi ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa-senyawa dari buah Jernang sebagai inhibitor enzim α -glukosidase menggunakan beberapa aplikasi seperti biovia discovery, open babel gui, autodock 4.2, autodock vina dan ligplot+. Diharapkan bahwa hasil simulasi ini dapat memberikan landasan ilmiah dalam pengembangan senyawa inhibitor alami yang efektif melalui pemanfaatan teknologi molecular docking.

I.2. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang permasalahan, rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana potensi senyawa yang terkandung dalam buah Jernang dalam mengikat enzim α -glukosidase secara molekuler melalui kajian penambatan molekul?
2. Apa saja senyawa-senyawa dalam buah Jernang yang dapat berpotensi sebagai penghambat aktivitas enzim α -glukosidase?

I.3. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas, tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Mengetahui potensi senyawa yang terdapat dalam buah Jernang sebagai inhibitor enzim α -glukosidase melalui kajian penambatan molekul.
2. Mengetahui jenis-jenis senyawa dalam buah Jernang yang dapat menjadi inhibitor enzim α -glukosidase.

I.4. Batasan Penelitian

1. Penelitian ini hanya akan memberikan prediksi teoretis atau hasil simulasi virtual dari interaksi senyawa dengan enzim α -glukosidase berdasarkan hasil *molecular docking*, tanpa verifikasi langsung melalui percobaan laboratorium.

2. Penelitian ini tidak mempertimbangkan faktor-faktor lain seperti biodisponibilitas, toksisitas, atau efek samping dari senyawa buah Jernang. Penelitian ini hanya akan berfokus pada potensi interaksi senyawa dengan enzim.
3. Enzim yang menjadi fokus adalah α -glukosidase, yang berperan dalam pemecahan karbohidrat menjadi glukosa dalam sistem pencernaan. Penelitian ini hanya akan menganalisis interaksi senyawa dengan enzim tersebut, bukan dengan enzim lain atau proses metabolisme lainnya yang berhubungan dengan diabetes.

