



**ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI
AKTIVITAS ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI
PROTEIN AHNAK *nucleoprotein*
PADA IKAN PAPUYU**

Skripsi
Diajukan guna memenuhi
sebagian syarat memperoleh derajat Sarjana Kedokteran
Fakultas Kedokteran Ilmu Kesehatan
Universitas Lambung Mangkurat

Oleh
Ikhsan Nasrul Hikam
2010911310003

**PROGRAM STUDI KEDOKTERAN PROGRAM SARJANA
FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU KESEHATAN
UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT
BANJARMASIN**

Desember 2023

PENGESAHAN SKRIPSI

ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI PROTEIN AHNAK nucleoprotein PADA IKAN PAPUYU

Ikhsan Nasrul Hikam, NIM : 2010911310003

Telah dipertahankan di hadapan Dewan Pengaji Skripsi
Program Studi Kedokteran Program Sarjana
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan
Universitas Lambung Mangkurat
Pada Hari Senin, Tanggal 18 Desember 2023

Pembimbing I

Nama: Prof. Dr. Drs. Eko Suhartono. M.Si
NIP : 196809071993031004

Pembimbing II

Nama: Dr. Dra. Fujiati. M.Si
NIP : 196401041994032001

Pengaji I

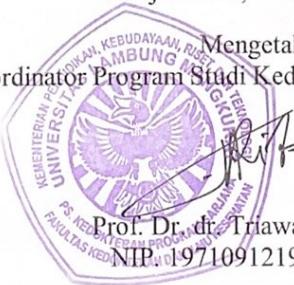
Nama: Dr. Isnaini. S.Si. M.Si. Apt
NIP : 197301311999032001

Pengaji II

Nama: dr. Mashuri. M.Kes., Sp.Rad(K)
NIP : 197402092001121001

Banjarmasin, Januari 2024

Mengetahui,
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana



Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes./
NIP. 197109121997022001

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Banjarmasin, 08 Desember 2023



Ikhsan Nasrul Hikam

ABSTRAK

ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI PROTEIN AHNAK *nucleoprotein* PADA IKAN PAPUYU

Ikhsan Nasrul Hikam

Penyakit degeneratif di Indonesia masih banyak diderita oleh masyarakat, khususnya di Kalimantan Selatan. Penyakit degeneratif adalah penyakit kronik menahun yang banyak mempengaruhi kualitas hidup seseorang, contohnya diabetes, hipertensi dan penyakit jantung, dari riskesdas 2018. Penyakit degeneratif merupakan penyakit yang disebabkan ketidakseimbangan antara radikal bebas dan antioksidan didalam tubuh manusia. Ketidakseimbangan ini dapat menyebabkan stress oksidatif pada tingkat sel dan jika terjadi secara terus menerus dapat menimbulkan gangguan pada metabolisme. Ikan papuyu memiliki kadar albumin yang tinggi. Hal ini kerena ikan papuyu yang selain mengandung protein juga mengandung protein, yang dimana protein yang tinggi berkemungkinan akan menjadi antioksidan. Antioksidan dapat menghambat radikal bebas yang beredar didalm tubuh dan, bisa menghambat sebelum pembentukan radikal bebas. Penelitian ini bertujuan untuk menganiisis ADMET dan studi biokumputasi aktivitas antioksidan pada ikan papuyu. Pada penelitian ini akan dilakukan menggunakan *in silico* menggubakan website Uniprot, untuk melihat database protein, website DTU Health Tech untuk melihat aktivitas antioksidan (Free Radical Score dan Metal Chelating Score), dan website pkCSM untuk melihat prediksi ADMET. Pada penelitian ini ditemukan tiga puluh dua peptide yang memiliki aktivitas antioksidan, dan digunakan sepuluh peptide yang memiliki nilai FRS dan MCS yang tertinggi, yaitu PHL, PHA, WG, PHI, LH, LHF, AH, RW, HL. Selanjutnya dilakukan prediksi ADMET untuk melihat sifat farmakokinetik dari peptida melihatpiotensi sebagai antioksidan.

Kata-kata kunci: *AHNAK nucleoprotein*, ikan papuyu, antioksidan, protein, peptida, ADMET

ABSTRACT

ADMET ANALYSIS AND BIOCOMPUTATIONAL STUDY OF ANTIOXIDANT PEPTIDE ACTIVITY OF PROTEIN AHNAK nucleoprotein IN PAPUYU FISH

Ikhsan Nasrul Hikam

*Degenerative diseases in Indonesia are still suffered by many people, especially in South Kalimantan. Degenerative disease is a chronic disease that greatly affects a person's quality of life, for example diabetes, hypertension and heart disease, from riskesdas 2018. Degenerative disease is a disease caused by an imbalance between free radicals and antioxidants in the human body. This imbalance can cause oxidative stress at the cellular level and if it occurs continuously it can cause disturbances in metabolism. Papuan fish have high levels of albumin. This is because papuyu fish which in addition to containing protein also contains protein, where high protein is likely to become an antioxidant. Antioxidants can inhibit free radicals circulating in the body and, can inhibit before the formation of free radicals. This research aims to conduct ADMET and biocomputation studies of antioxidant activity in papuyu fish. In this research, it will be carried out using *in silico* using the website Uniprot, to view the protein database, DTU Health Tech website to view antioxidant activity (Free Radical Score and Metal Chelating Score), and pkCSM website to view ADMET predictions. In this study, thirty-two peptides were found to have antioxidant activity, and ten peptides were used that have the highest FRS and MCS values, namely PHL, PHA, WG, PHI, LH, LHF, AH, RW, HL. Furthermore, ADMET's prediction was made to see the pharmacokinetic properties of peptides seeing positive as an antioxidant.*

Keywords: AHNAK nucleoprotein, antioxidant, protein, peptide, ADMET

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT, Tuhan Yang Maha Esa atas rahmat-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “**ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI PROTEIN AHNAK *nucleoprotein* PADA IKAN PAPUYU**” dengan tepat waktu. Shalawat dan salam tak lupa pula penulis panjatkan kepada Nabi Muhammad SAW, keluarga, sahabat, kerabat, dan pengikut Beliau hingga akhir zaman. Aamiin Aamiin Aamiin Ya Rabbal Alamin.

Skripsi ini dibuat sebagai syarat untuk memperoleh derajat sarjana kedokteran di Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat. Pada kesempatan ini penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat, Dr. dr. Istiana, M.Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana, Prof. Dr. dr. Triawanti, M. Kes. yang telah memberi kesempatan dalam pelaksanaan penelitian.
3. Dosen pembimbing akademik Dr. dr. Iwan Aflanie, M. Kes., Sp.F., S.H. yang telah membimbing selama masa perkuliahan.

4. Kedua dosen pembimbing, Prof. Dr. Eko Suhartono, M.Si dan Dr. Dra. Fujiati, M.Si yang dengan sabar membantu memberikan saran, masukan, arahan, serta semangat dalam penyelesaian skripsi ini.
5. Kedua dosen penguji, Dr. Isnaini, S.Si, M.Si, Apt dan dr. Mashuri, M.Kes., Sp. Rad (K) yang telah memberikan kritik serta saran sehingga skripsi ini menjadi lebih baik.
6. Kedua orang tua penulis terutama ibu tercinta Eka purwantini. dan Bapak tercinta Kabul M.Pd dan Kakak saya Putri Diana Amrita M.Pd dan Isna Aisyah Amini S.Psi yang memberikan restu, doa, dan semangat, serta keluarga yang penulis amat sayangi.
7. Rekan sejawat penelitian, Muhammad Naufal Allam, Nibras Sayyidah Amini Lahdimawan dan Iqmal Fadlillah Pratama yang menjadi teman dalam suka duka gelap terang dalam penelitian ini, serta tak lupa teman saya Muhammad Amar Qistan Ridhani dan Rifki Muhammad Triatmojo yang telah membantu dalam penelitian ini dan kepada teman teman Awen yg telah memberikan dukungan moral dan moril dalam penelitian ini dan rekan sejawat Program Studi Kedokteran Program Sarjana angkatan 2020.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, akan tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan.

Banjarmasin, Desember 2023

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
ABSTRAK.....	iv
KATA PENGANTAR.....	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR.....	xi
DAFTAR SINGKATAN.....	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang Masalah	1
B. Rumusan Masalah	3
C. Tujuan Penelitian.....	3
D. Manfaat Penelitian.....	4
E. Keaslian Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
A. Radikal Bebas dan Antioksidan	5
B. Protein.....	7
C. Ikan Papuyu	8
D. <i>In Silico</i>	10

E. ADMET	10
BAB III LANDASAN TEORI	12
BAB IV METODE PENELITIAN	16
A. Rancangan Penelitian	16
B. Instrumen Penelitian	16
C. Variabel Penelitian	16
D. Definisi Operasional.....	17
E. Prosedur Penelitian	18
F. Analisis Data	19
G. Waktu dan Tempat Penelitian.....	19
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	24
BAB VI PENUTUP	36
A. Simpulan	36
B. Saran	36
DAFTAR PUSTAKA.....	38
LAMPIRAN	41

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
1.1 Keaslian Penelitian Analisa ADMET dan Studi Biokomputasi Aktivitas Antioksidan Peptida dari Protein <i>AHNAK nucleoprotein</i> pada Ikan papuyu.....	6
5.1 Peptida Dari Protein <i>AHNAK nucleoprotein</i> Yang Memiliki Aktivitas Antioksidan.....	25
5.2 Hasil Prediksi Absorpsi pkCSM.....	27
5.3 Hasil Prediksi Distribusi pkCSM.....	28
5.4 Hasil Prediksi Metabolisme pkCSM.....	29
5.5 Hasil Prediksi Eksresi pkCSM.....	30
5.6 Hasil Prediksi Toxicity pkCSM.....	31

DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
2.1 Ikan Papuyu		8
3.1 Skema Kerangka Teori Analisis ADMET dan Studi Biokomputasi Aktivitas Antioksidan peptida dari protein <i>AHNAK nucleoprotein</i> pada Ikan Papuyu		14
3.2 Skema Kerangka Konsep Analisis ADMET dan Studi Biokomputasi Aktivitas Antioksidan peptida dari protein <i>AHNAK nucleoprotein</i> pada Ikan Papuyu		15

DAFTAR SINGKATAN

ADMET	: <i>Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity</i>
ATP	: Adenosin Trifosfat
DNA	: <i>Deoxyribonucleic Acid</i>
pkCSM	: <i>Preclinical Knowledge-Based Computational Systems Model</i>
VDss	: <i>Volume of Distribution at Steady State</i>
BBB	: <i>Blood-Brain Barrier</i>
CNS	: <i>Central Nervous System</i>
OCT2	: <i>Organic Cation Transporter 2</i>
MRTD	: <i>Maximum Recommended Tolerated Dose</i>
hERG	: <i>Human Ether-a-go-go-gene</i>
LD50	: <i>Median Lethal Dose</i>
LOAEL	: <i>Lowest Observed Adverse Effect Level</i>
<i>T. Pyriformis</i>	: <i>Tetrahymena Pyriformis</i>
LC50	: <i>Lethal Concentration Values</i>
SOD	: <i>Superoxide Dismutase</i>
MDA	: <i>Malondialdehyde</i>
Cltot	: <i>Clearance Total</i>