



**ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI  
AKTIVITAS ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI  
PROTEIN *Ycf2* PADA DAUN RAMANIA**

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

Oleh  
Iqmal Fadlillah Pratama  
2010911210016

**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 YCF2  
PADA DAUN RAMANIA**

**Iqmal Fadlillah Pratama, NIM : 2010911210016**

Telah dipertahankan di hadapan **Dewan Penguji 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

**Penguji I**

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

**Penguji 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. 19710912 199702 2 001

## **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



**Iqmal Fadlillah Pratama**

## ABSTRAK

# ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI PROTEIN *Ycf2* PADA DAUN RAMANIA

Iqmal Fadlillah Pratama

Penyakit degeneratif masih menjadi ancaman yang serius di dalam bidang kesehatan. Menurut Riskesdas 2018 menunjukkan prevalensi penyakit degeneratif mengalami kenaikan jika dibandingkan dengan Riskesdas 2013, antara lain diabetes melitus, hipertensi, penyakit jantung kronis. Salah satu penyebab kenaikan penyakit degeneratif ini terjadi karena ketidakseimbangan antara antioksidan dan radikal bebas pada tubuh manusia. Tanaman Ramania (*Bouea Macrophylla*) memiliki kandungan flavonoid yang tinggi sehingga senyawa sekunder flavonoid pada daun ramania dapat berperan sebagai antioksidan yang digunakan untuk menghambat dan menghentikan radikal bebas. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis ADMET dan studi biokomputasi aktivitas antioksidan pada daun ramania. Penelitian ini menggunakan metode studi biokomputasi atau secara *in silico*, melalui *website* Uniprot untuk menentukan data protein, *website* DTU Health Tect untuk menilai *Free Radical Score* dan *Metal Chelating Score*, dan juga melalui *website* pkCSM untuk mengetahui sifat farmakokinetika senyawa yang terkandung dalam daun ramania. Berdasarkan hasil penelitian, terdapat empat puluh delapan peptida pada daun ramania namun yang digunakan hanya sepuluh peptida yang memiliki FRS dan MRS tertinggi, yaitu LHH, HH, YYI, VYY, YLY, YGY, YQY, HRH, PWG, PW. sepuluh peptida tersebut berinteraksi dengan protein *Ycf2* seperti aktivasi, berikatan, ekspresi, dan penghambatan. Pada analisis ADMET didapatkan sifat farmakokinetika pada sepuluh senyawa tersebut sehingga diketahui potensi senyawa tersebut sebagai antioksidan.

**Kata-kata kunci:** daun ramania, antioksidan, peptida, ADMET

## **ABSTRACT**

### **ADMET ANALYSIS AND BIOCOMPUTATIONAL ASSESSMENT OF ANTIOXIDANT PEPTIDE ACTIVITY OF Ycf2 PROTEIN IN RAMANIA LEAVES**

**Iqmal Fadlillah Pratama**

*Degenerative diseases are still a serious threat in the health sector. According to Riskesdas 2018, which shows the preparation of degenerative diseases increases when compared to the risk of 2013, including diabetes mellitus, hypertension, chronic heart disease. One of the causes of increased degenerative diseases occurs due to an imbalance between antioxidants and free radicals in the human body. Ramania (Bouea macrophylla) plants have high flavonoids so that the secondary compounds of flavonoids in ramania leaves can act as antioxidants used to inhibit and stop free radicals. This study aims to analyze the study of admet and biocumpting antioxidant activity in ramania leaves. This study uses the Biocomputation Study Method or in Silico, through the Uniprot website to determine protein data, the DTU Health Tect website to assess the free radical score and metal chelating scores, and also through the PKCSM website to determine the pharmacokinetics of the compound contained in Ramania. Based on the results of this study, there are forty peptides in Ramania leaves but only ten peptides are used that have the highest FR and MRS, namely LHH, HH, YYI, VYY, YLY, YGY, YQY, HRH, PWG, PWG. Ten peptides interact with Ycf2 proteins such as activation, binding, expression, and inhibition. In Admet analysis, pharmacokinetic properties are obtained in ten compounds so that the potential of these compounds is known as antioxidants.*

**Keywords:** ramania leaves, antioxidants, peptides, 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 *Ycf2* PADA DAUN RAMANIA**” dengan tepat waktu.

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. Kedua dosen pembimbing, Prof. Dr. Drs. Eko Suhartono, M.Si dan Dr. Dra. Fujiati, M.Si yang dengan sabar membantu memberikan saran, masukan, arahan, serta semangat dalam penyelesaian skripsi ini.
4. Kedua dosen penguji, Dr. Isnaini, S.Si, M.Si, Apt dan dr. Mashuri, Sp.Rad(K)RI, M.Kes dan yang telah memberikan kritik serta saran sehingga skripsi ini menjadi lebih baik.

5. Kedua orang tua penulis terutama Ibu tercinta Rasika Ningsih, S.E dan Bapak tercinta Wepi Padria Iroma, S.E, M.AP serta adik Rayhel Reginald Raiqal, Chayyara Adzkie Pouri, Maqil Ghavi Al-Hanan yang memberikan restu, doa, dan semangat, serta keluarga yang penulis amat sayangi.
  6. Rekan sejawat penelitian, Ikhsan Nasrul Hikam, Muhammad Naufal Allam, dan Nibras Sayyidah Amini Lahdimawan, yang menjadi teman dalam suka duka penelitian ini,
  7. Rekan peneliti, Ihyar, Rifki Muhammad Triatmojo, Muhammad Amar Qistan Ridhani, Angger Ariewardana, Yoga Aditya Noor Ramadhan, Muhammad Rakha Zulfikar, Naufal Fikri Akmal, Moreno Advella Tanujaya, Zeta Zafira, Rifa Luthfiyyah, Aisyah Arba'ati, Nurhayati, Sabrina Wahda Utami, Normaisarah yang menjadi teman untuk memberikan semangat dan dukungan sehingga skripsi ini dapat terselesaikan.
  8. Rekan sejawat Program Studi Kedokteran Program Sarjana angkatan 2020 terima kasih sudah menemani dalam masa perkuliahan dan memberikan pengalaman yang bisa dijadikan pembelajaran dimasa yang akan datang.
- 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

	<b>Halaman</b>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	i
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	ii
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	iii
<b>ABSTRAK</b> .....	iv
<b>ABSTRACT</b> .....	v
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	vi
<b>DAFTAR ISI</b> .....	viii
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	x
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xi
<b>DAFTAR SINGKATAN</b> .....	xii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	1
A. Latar Belakang Masalah .....	1
B. Rumusan Masalah .....	3
C. Tujuan Penelitian .....	4
D. Manfaat Penelitian .....	4
E. Keaslian Penelitian .....	5
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	6
A. Radikal bebas dan antioksidan .....	6
B. Protein <i>Ycf2</i> .....	8
C. Ramania .....	8
D. Studi Biokomputasi .....	11



E. ADMET .....	11
<b>BAB III LANDASAN TEORI .....</b>	<b>12</b>
A. Landasan Teori .....	12
<b>BAB IV METODE PENELITIAN .....</b>	<b>15</b>
A. Rancangan Penelitian.....	15
B. Instrumen Penelitian .....	15
C. Variabel Penelitian.....	15
D. Definisi Operasional .....	15
E. Prosedur Penelitian .....	16
F. Analisis Data.....	18
G. Waktu dan Tempat Penelitian.....	22
<b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>23</b>
<b>BAB VI PENUTUP .....</b>	<b>37</b>
A. Simpulan.....	37
B. Saran.....	37
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>39</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>45</b>

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>		<b>Halaman</b>
1.1	Keaslian Penelitian Analisa ADMET dan Studi Biokomputasi Aktivitas Antioksidan Peptida dari Protein <i>Ycf2</i> pada daun ramania.. .....	5
5.1	Peptida Dari Protein <i>Ycf2</i> Yang Memiliki Aktivitas Antioksidan.....	23
5.2	Hasil Prediksi Absorpsi pkCSM.....	27
5.3	Hasil Prediksi Distribusi pkCSM.....	29
5.4	Hasil Prediksi Metabolisme pkCSM.....	31
5.5	Hasil Prediksi Eksresi pkCSM.....	32
5.6	Hasil Prediksi Toxicity pkCSM.....	33

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar</b>		<b>Halaman</b>
2.1	Daun Ramania.....	9
3.1	Skema Kerangka Teori Penelitian Analisis ADMET dan Studi Biokomputasi Aktivitas Antioksidan Peptida dari Protein <i>Ycf2</i> pada daun ramania .....	14
3.2	Skema Kerangka Konsep Penelitian Analisis ADMET dan Studi Biokomputasi Aktivitas Antioksidan Peptida dari Protein <i>Ycf2</i> pada daun ramania .....	14

## DAFTAR SINGKATAN

ADMET	: <i>Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity</i>
DNA	: <i>Deoxyribonucleic</i>
FRS	: <i>Free Radical Score</i>
MCS	: <i>Metal Chelating Score</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>
Cl <sub>tot</sub>	: <i>Clearance Total</i>