



**KARAKTERISASI DAN *DOCKING* MOLEKULER
MINYAK BULUS (*Amyda cartilaginea*) TERHADAP
PROTEIN ENVELOPE VIRUS TEMBUSU**

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

Oleh
Alfi Ramadhani
2210911110005

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

Januari 2026

PENGESAHAN SKRIPSI

**KARAKTERISASI DAN DOCKING MOLEKULER MINYAK BULUS
(*Amyda cartilaginea*) TERHADAP PROTEIN ENVELOPE VIRUS
TEMBUSU**

Alfi Ramadhani, NIM: 2210911110005

Telah dipertahankan di hadapan **Dewan Penguji Skripsi**
Program Studi Kedokteran Program Sarjana
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan
Universitas Lambung Mangkurat
Pada Hari Jumat, Tanggal 5 Desember 2025

Pembimbing I

Nama : Bambang Setiawan, S.Ked, M.Biomed
NIP : 197903092005011003

Pembimbing II

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

Penguji I

Nama : Dr. drh. Erida Wydiamala, M.Kes
NIP : 196509031994032001

Penguji II

Nama : dr. Rahmiati, Sp.MK, M.Kes
NIP : 197604072003122011



Banjarmasin, 7 Januari 2026

Mengetahui,
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana

Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes. *m*
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, 5 Desember 2025



Alfi Ramadhani

ABSTRAK

KARAKTERISASI DAN *DOCKING* MOLEKULER MINYAK BULUS (*Amyda cartilaginea*) TERHADAP PROTEIN ENVELOPE VIRUS TEMBUSU

Alfi Ramadhani

Penelitian ini mengevaluasi potensi ekstrak minyak bulus (*Amyda cartilaginea*) sebagai kandidat antivirus terhadap Tembusu virus (TMUV) melalui pendekatan *in silico* dengan molecular docking. Hasil analisis menunjukkan bahwa senyawa utama seperti 9,12,15-Octadecatrienoic acid methyl ester, ETHYL OCTADEC-9-ENOATE, memiliki nilai binding affinity berturut-turut sebesar -5,8; dan -5,4 kcal/mol terhadap protein envelope TMUV. Nilai binding affinity negatif ini menandakan interaksi yang kuat dan peluang senyawa sebagai inhibitor kompetitif replikasi virus. Evaluasi ADMET memperlihatkan mayoritas senyawa utama tergolong aman secara farmakokinetik (absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi) maupun toksisitas, sehingga memiliki potensi tinggi untuk dikembangkan sebagai bahan bioaktif antivirus alami. Studi ini memberikan kontribusi data awal yang mendukung pengembangan minyak bulus sebagai fitofarmaka veteriner untuk memperkuat biosekuriti unggas nasional dan direkomendasikan dilakukan validasi lebih lanjut secara *in vitro* maupun *in vivo* guna memastikan efektivitas dan keamanannya.

Kata-kata kunci: bulus, virus tembusu, affinitas ikatan.

ABSTRACT

CHARACTERIZATION AND MOLECULAR DOCKING OF SOFTSHELL TURTLE OIL (*Amyda cartilaginea*) AGAINST THE ENVELOPE PROTEIN OF TEMBUSU VIRUS

Alfi Ramadhani

*This study investigates the potential of softshell turtle (*Amyda cartilaginea*) oil extract as a candidate antiviral agent against Tembusu virus (TMUV) using an in silico molecular docking approach. The main bioactive compounds, including 9,12,15-octadecatrienoic acid methyl ester, ETHYL OCTADEC-9-ENOATE, demonstrated strong interaction with TMUV envelope protein, with binding affinity values of -5.5, -5.6, and -5.5 kcal/mol, respectively. These negative binding affinities indicate significant inhibitory potential as viral replication competitors. ADMET evaluation showed that most principal compounds possess safe pharmacokinetic and toxicity profiles, supporting their feasibility for further development as natural antiviral agents. This study provides preliminary data supporting the application of *Amyda cartilaginea* oil as a veterinary phytopharmaceutical for poultry biosecurity and recommends further in vitro and in vivo validation to ensure efficacy and safety.*

Keywords: *softshell turtle, tembusu virus, binding affinity.*

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul **“KARAKTERISASI DAN DOCKING MOLEKULER MINYAK BULUS (*Amyda cartilaginea*) TERHADAP PROTEIN ENVELOPE VIRUS TEMBUSU”** tepat pada waktunya. Shalawat serta salam penulis panjatkan kepada Nabi Muhammad SAW, keluarga, sahabat, dan kerabat penulis.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat sarjana kedokteran di Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Prof. Dr. dr. Syamsul Arifin, M.Pd, FISPH, FISCM yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordiantor Program Studi Kedokteran Program Sarjana Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
3. Kedua dosen pembimbing Bambang Setiawan, S.Ked, M.Biomed. dan dr. Mashuri, Sp. Rad., Sub. Sp. RI(K), M.Kes yang berkenan memberikan saran dan arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

4. Kedua dosen penguji Dr. drh. Erida Wydiamala, M.Kes dan dr. Rahmiati, Sp.MK, M.Kes yang memberi kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi semakin baik.
5. Orang tua tercinta Iwiyani dan Fauzi yang selalu memberikan dukungan moral, spiritual, serta doa tiada henti. Tanpa kasih sayang dan motivasi dari kalian, penulis tidak akan mampu sampai pada titik ini.
6. Partner Helena Putri Sakinah yang selalu mendampingi dan memberikan semangat baik dalam suka maupun duka, selama masa kuliah dan proses pengerjaan skripsi ini.
7. Asisten Praktikum Biokim, Pari-Pari, dan teman-teman penulis yang telah memberikan motivasi, semangat, serta sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.
8. Rekan penelitian M. Prayoga Haryutama, serta semua pihak atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.

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

Banjarmasin, Desember 2025

Penulis

DAFTAR ISI

| | Halaman |
|--|----------------|
| HALAMAN JUDUL | i |
| HALAMAN PENGESAHAN | ii |
| HALAMAN PERNYATAAN | iii |
| ABSTRAK | iv |
| ABSTRACT | v |
| KATA PENGANTAR | vi |
| DAFTAR ISI | viii |
| DAFTAR TABEL | x |
| DAFTAR GAMBAR | xi |
| DAFTAR LAMPIRAN | xii |
| DAFTAR SINGKATAN | xiii |
| BAB I PENDAHULUAN | 1 |
| A. Latar Belakang Masalah | 1 |
| B. Rumusan Masalah | 4 |
| C. Tujuan Penelitian | 4 |
| D. Manfaat Penelitian | 5 |
| E. Keaslian Penelitian | 5 |
| BAB II TINJAUAN PUSTAKA | 7 |
| A. Tembusu Virus (TMUV) | 7 |
| B. <i>Amyda cartilaginea</i> (Bulus) | 16 |
| C. Studi In Silico dalam Penelitian <i>Antivirus</i> | 19 |
| D. ADMET | 21 |

| | |
|--|-----------|
| E. Penelitian Terkait..... | 23 |
| BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS..... | 26 |
| A. Landasan Teori | 26 |
| B. Hipotesis..... | 31 |
| BAB IV METODOLOGI PENELITIAN..... | 32 |
| A. Rancangan Penelitian | 32 |
| B. Instrumen Penelitian..... | 32 |
| C. Variabel Penelitian | 33 |
| D. Prosedur Penelitian | 33 |
| E. Teknik Pengumpulan Data | 34 |
| F. Cara Analisi Data | 35 |
| BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN | 36 |
| BAB VI PENUTUP | 49 |
| A. Simpulan | 49 |
| B. Saran..... | 50 |
| DAFTAR PUSTAKA..... | 51 |
| LAMPIRAN..... | 55 |

DAFTAR TABEL

| Tabel | | Halaman |
|-------|--|---------|
| 1.1 | Keaslian Penelitian Ekstrak Minyak Bulus sebagai Antivirus Tembusu..... | 5 |
| 5.1 | Konsentrasi asam lemak pada ekstrak minyak bulus..... | 39 |
| 5.2 | Analisis ADMET pada asam lemak ekstrak minyak bulus..... | 40 |
| 5.3 | Hasil <i>binding affinity</i> pada asam lemak ekstrak minyak bulus dengan <i>protein envelope</i> virus..... | 42 |

DAFTAR GAMBAR

| Gambar | | Halaman |
|--------|---|---------|
| 2.1 | Distribusi TMUV pada BMECs otak itik (TEM)..... | 9 |
| 3.1 | Kerangka Teori..... | 31 |
| 3.2 | Kerangka Konsep..... | 32 |
| 4.1 | Skema Prosedur Penelitian..... | 36 |
| 4.2 | Skema Cara Analisis Penelitian..... | 37 |
| 5.1 | Profil kromatografi minyak bulus (<i>Amyda cartilaginea</i>)..... | 39 |
| 5.2 | Hubungan <i>intermolecular</i> 2 dimensi pada 9,12,15- <i>Octadecatrienoic acid, methyl ester</i> dengan virus tembusu | 45 |
| 5.3 | Hubungan <i>intermolecular</i> 2 dimensi pada 9,12,15- <i>Octadecatrienoic acid, methyl ester</i> dengan virus <i>dengue</i> ... | 47 |
| 5.4 | Hubungan <i>intermolecular</i> 2 dimensi pada 11- <i>Octadecenoic acid, methyl ester</i> dengan virus <i>japanese ensefalitis</i> | 50 |

DAFTAR LAMPIRAN

| Lampiran | | Halaman |
|-----------------|--|----------------|
| 1 | Hasil <i>Screening</i> Asam Lemak GC-MS..... | 62 |
| 2 | Skema <i>Molecular Docking</i> | 63 |
| 3 | Hasil <i>Molecular Docking</i> | 64 |
| 4 | Hasil Interaksi <i>Intermolecular</i> | 82 |

DAFTAR SINGKATAN

| | |
|------------------|---|
| +ssRNA | : <i>Positive-Sense Single-Stranded RNA</i> |
| ALA | : <i>Alpha-Linolenic Acid</i> (Asam Alfa-Linolenat, Omega-3) |
| ADME | : <i>Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion</i> |
| AutoDock | : Perangkat lunak untuk simulasi molecular docking |
| BBB | : <i>Blood Brain Barrier</i> |
| C | : <i>Capsid Protein</i> |
| CD8+ | : Sel T Sitotoksik |
| Discovery Studio | : Perangkat lunak analisis dan visualisasi molekul |
| E | : <i>Envelope Protein</i> |
| FKIK | : Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan |
| GC-MS | : <i>Gas Chromatography-Mass Spectrometry</i> |
| HBA | : <i>Hydrogen Bond Acceptor</i> (Penerima Ikatan Hidrogen) |
| HBD | : <i>Hydrogen Bond Donor</i> (Pemberi Ikatan Hidrogen) |
| KEPK | : Komite Etik Penelitian Kesehatan |
| LA | : <i>Linoleic Acid</i> (Asam Linoleat, Omega-6) |
| MHC I | : <i>Major Histocompatibility Complex Class I</i> |
| MW | : <i>Molecular Weight</i> (Berat Molekul) |
| NS | : <i>Non-Structural Protein</i> |
| NS1–NS5 | : Protein non-struktural virus TMUV (NS1, NS2A, NS2B, NS3, NS4A, NS4B, NS5) |
| ORF | : <i>Open Reading Frame</i> |

| | |
|---------|--|
| PDB | : <i>Protein Data Bank</i> |
| prM/M | : <i>Pre-membrane/Membrane Protein</i> |
| PSA | : <i>Polar Surface Area</i> |
| PyRx | : Platform untuk pemodelan molekuler dan docking |
| RNA | : <i>Ribonucleic Acid</i> |
| RMSD | : <i>Root Mean Square Deviation</i> |
| RT-PCR | : <i>Reverse Transcription Polymerase Chain Reaction</i> |
| SFA | : <i>Saturated Fatty Acids</i> (Asam Lemak Jenuh) |
| SMF IPD | : Staf Medik Fungsional Ilmu Penyakit Dalam |
| TMUV | : <i>Tembusu Virus</i> |
| UFA | : <i>Unsaturated Fatty Acids</i> (Asam Lemak Tak Jenuh) |
| UPKTI | : Unit Pengelola Karya Tulis Ilmiah |
| UTR | : <i>Untranslated Region</i> |