



**ANALISIS POTENSI ANTIDIABETIK DARI PEPTIDA BIOAKTIF  
IKAN GABUS (*CHANNA STRIATA*) SECARA *IN SILICO***

**SKRIPSI**

**Untuk memenuhi persyaratan  
dalam menyelesaikan program sarjana Strata-1**

**Oleh:**

**MUHAMMAD EHSAN**

**NIM 1911012210015**

**PROGRAM STUDI S-1 KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN  
ALAM UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
BANJARBARU  
2024**

**SKRIPSI**

**ANALISIS POTENSI ANTIDIABETIK DARI PEPTIDA BIOAKTIF  
IKAN GABUS (*CHANNA STRIATA*) SECARA *IN SILICO***


Oleh:

**MUHAMMAD EHSAN**

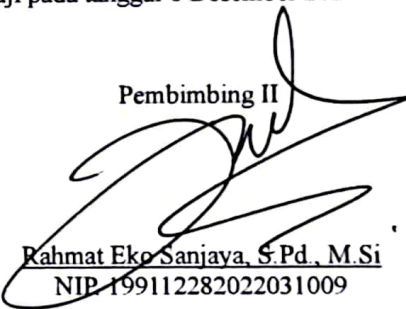
**NIM 1911012210015**

Telah dipertahankan di depan Dosen Penguji pada tanggal 6 Desember 2024

Pembimbing I

  
Noer Komari, S.Si., M.Kes  
NIP. 19671010 199502 1 001

Pembimbing II

  
Rahmat Eko Sanjaya, S.Pd., M.Si  
NIP. 199112282022031009

Mengetahui

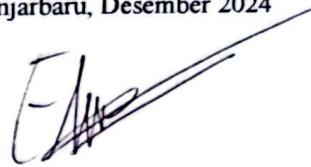
Koordinator Program Studi

  
Dr. Ahmad Budi Junaidi, S.Si, M.Sc.  
NIP. 197603042001121003

## PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak dibuat karya tulis yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang sepengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam Daftar Pustaka.

Banjarbaru, Desember 2024



Muhammad Ehsan

NIM. 1911012210015

## ABSTRAK

**ANALISIS POTENSI ANTIDIABETIK DARI PEPTIDA BIOAKTIF IKAN GABUS (*Channa striata*) SECARA *IN SILICO*** (Oleh Muhammad Ehsan; Pembimbing Noer Komari, S.Si., M.Kes, Rahmat Eko Sanjaya S.Pd., M.Si.; 2024; 56 Halaman)

Diabetes melitus yang adalah penyakit peringkat ketiga sebagai penyebab kematian setelah kanker dan kardiovaskular. Diabetes Melitus dapat ditangani dengan pengobatan konvensional yang jika dilakukan terus menerus akan menyebabkan berbagai komplikasi sehingga memerlukan metode pengobatan yang lebih bisa diandalkan seperti pemanfaatan peptida bioaktif. *Channa striata* atau ikan gabus memiliki potensi yang baik sebagai sumber peptida bioaktif antidiabetes. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan kandidat sumber peptida bioaktif antidiabetes dari protein Ikan gabus (*Channa striata*) dengan metode *in silico*. Sekuen Ikan gabus (A0A0U1WLA1 dan T1QW49) didapat dari UniProt KB. Peptida bioaktif diperoleh dari proses hidrolisis menggunakan *Peptide Cutter*. Kemudian peptida bioaktif akan melalui proses *Virtual screening* dengan berbagai *Prediction Tools* (Innovagen AB, AllerTOP, ProTox-II, admetSAR). Hasil *Virtual Screening* dinyatakan sebagai ligan uji dan digunakan pada *webserver* BIO-HPC DIA DB untuk memprediksi reseptor protein yaitu glukokinase dan PPAR-delta. Ligan uji dan reseptor protein yang sudah dipreparasi selanjutnya dilakukan *Molecular docking* dengan *webserver* SwissDock. Hasil penelitian ini menunjukkan sekuen peptida ASSAVEAGAGTG berpotensi menghambat reseptor protein PPAR-delta dengan nilai energi ikatan ( $\Delta G$ ) sebesar -10,05 Kkal/mol dan membentuk interaksi residu asam amino terbentuk 3 ikatan hidrogen hidrogen dan 19 ikatan hidrofobik. Sekuen peptida EA berpotensi menghambat reseptor protein glukokinase dengan nilai energi ikatan ( $\Delta G$ ) sebesar -11.88 Kkal/mol dan membentuk interaksi residu asam amino terbentuk 2 ikatan dan 15 ikatan hidrofobik. Kedua peptida bioaktif memiliki stabilitas yang tinggi dan berpotensi sebagai kandidat obat antidiabetes.

Kata kunci: Diabetes melitus, peptida bioaktif, *channa striata*, antidiabetes, *virtual screening*, *molecular docking*

## ABSTRACT

### ***IN SILICO* ANALYSIS OF THE ANTIDIABETIC POTENTIAL OF BIOACTIVE PEPTIDES FROM *CHANNA STRIATA* (SNAKEHEAD FISH)**

(By Muhammad Ehsan; Supervisor Noer Komari, S.Si., M.Kes., Rahmat Eko Sanjaya S.Pd., M.Si.; 2024; 56 Page)

Diabetes mellitus is the third leading cause of death after cancer and cardiovascular diseases. Diabetes mellitus can be managed with conventional treatments; however, prolonged use of these treatments may lead to various complications, requiring more reliable therapeutic methods such as the use of bioactive peptides. *Channa striata* (snakehead fish) has significant potential as a source of bioactive anti-diabetic peptides. This study aims to identify potential bioactive anti-diabetic peptides from *Channa striata* protein using an *in silico* approach. The sequences of *Channa striata* (A0A0U1WLA1 and T1QW49) were obtained from UniProt KB. Bioactive peptides were generated through a hydrolysis process using Peptide Cutter. These peptides were then subjected to virtual screening using various prediction tools (Innovagen AB, AllerTOP, ProTox-II, admetSAR). The results of the virtual screening were analyzed as test ligands and used in the BIO-HPC DIA DB webserver to predict the protein receptors, specifically glucokinase and PPAR-delta. The test ligands and protein receptors were then prepared for molecular docking using the SwissDock webserver. The results showed that the peptide sequence ASSAVEAGAGTG has the potential to inhibit the PPAR-delta receptor with a binding energy ( $\Delta G$ ) of -10.05 Kcal/mol, forming 3 hydrogen bonds and 19 hydrophobic interactions. The peptide sequence EA has the potential to inhibit the glucokinase receptor with a binding energy ( $\Delta G$ ) of -11.88 Kcal/mol, forming 2 hydrogen bonds and 15 hydrophobic interactions. Both bioactive peptides exhibited high stability and have the potential as anti-diabetic drug candidates.

Keywords: Diabetes mellitus, bioactive peptide, channa striata, antidiabetes, virtual screening, molecular docking

## PRAKATA

Puji dan syukur Allah SWT berkat rahmat dan hidayah-Nya hingga penelitian yang berjudul “Analisis Potensi Antidiabetik dari Peptida Bioaktif Ikan Gabus (*Channa Striata*) Secara *In silico*” dapat diselesaikan. Shalawat serta salam selalu tercurah kepada Rasulullah Shalallahu ‘Alaihi Wasallam beserta keluarga, kerabat, dan sahabatnya yang telah memberikan petunjuk dan membawa dari zaman jahiliah menuju zaman terang benderang.

Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan skripsi ini tidak dapat terlaksana dengan baik tanpa bantuan dari berbagai pihak. Oleh karenanya pada kesempatan ini penulis ingin mengucapkan terimakasih dan penghargaan sebesar-besarnya kepada:

- Pihak instansi Universitas Lambung Mangkurat Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam.
- Bapak Noer Komari S.Si., M.Kes. selaku Dosen Pembimbing I yang telah banyak memberikan bimbingan, pengetahuan, ide, saran, motivasi, dan waktu yang diluangkan selama penelitian dan penyusunan skripsi
- Bapak Rahmat Eko Sanjaya S.Pd., M.Si. selaku Dosen Pembimbing II yang telah banyak memberikan bimbingan, arahan, saran dan dorongan selama penyelesaian skripsi
- Achmad Ramadhanna'il Rasjava, S.Si., M.Si. dan Dr. Ahmad Budi Junaidi, S.Si., M.Sc. selaku Dosen Penguji yang telah menyediakan waktu dan memberikan kritik serta saran yang membangun untuk penyusunan skripsi ini menjadi lebih baik
- Ibu Dahlena Ariyani S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan bimbingan, nasehat, arahan selama perkuliahan
- Dosen dan staf di lingkungan Universitas Lambung Mangkurat terutama Dosen Program Studi Kimia yang telah memberikan pengetahuan selama penulis belajar di bangku perkuliahan
- Ayah, Ibu, Kakak, Adik-adik yang telah memberikan do'a dan dukungan baik moral maupun materi, penulis sangat bersyukur karena telah memiliki kelaurga yang sangat luar biasa

- Teman-teman satu tim penelitian, yaitu Itqan Thaya Al Khalily, Nafisah, M. Insan Zakia Safar yang telah berjuang bersama dan saling membantu dalam penelitian
- Seluruh teman teman Kimia angkatan 2019 yang telah berjuang bersama-sama dan kerabat, teman dan lainnya yang tidak dapat disebutkan satu persatu.
- Terakhir, penulis ingin berterima kasih kepada diri sendiri karena telah bekerja keras untuk menyelesaikan skripsi ini

Penulis menyadari bahwa terdapat berbagai kekurangan dalam penulisan maupun penyusunan skripsi ini. Oleh karenanya, penulis sangat mengharapkan saran dan masukan guna kesempurnaan penulisan kedepannya. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi kita terkhusus dalam hal pengembangan ilmu pengetahuan

Banjarbaru, Desember 2024

Penulis

## DAFTAR ISI

	<b>Halaman</b>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	<b>ii</b>
<b>PERNYATAAN</b> .....	<b>iii</b>
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>iv</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>v</b>
<b>PRAKATA</b> .....	<b>vi</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>vii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>x</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	<b>xiv</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian .....	3
1.4 Manfaat Penelitian .....	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>5</b>
2.1 Ikan gabus ( <i>Channa striata</i> ) .....	5
2.2 Protein .....	7
2.2.1 Sitokrom c oksidase .....	8
2.2.2 Miosin .....	9
2.3 Peptida Bioaktif.....	9
2.4 Diabetes Melitus .....	11
2.5 <i>Database dan Tools untuk Virtual Screening</i> .....	13
2.5.1 Uniprot KB.....	13
2.5.2 Peptide Cutter .....	14
2.5.3 Innovagen AB .....	14
2.5.4 Allertop v2.0 .....	15
2.5.5 ProTox-II .....	15
2.6 AdmetSAR 2.0 .....	16

2.7	BIO-HPC DIA-DB .....	16
2.8	<i>Molecular Docking</i> .....	17
<b>BAB III METODE PENELITIAN .....</b>		<b>18</b>
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian .....	18
3.2	Alat .....	18
3.3	Bahan .....	18
3.4	Prosedur kerja .....	19
3.4.1	Pemilihan Sekuen Protein .....	19
3.4.2	Analisis Karakteristik Fisiko-Kimia Sekuen Protein .....	19
3.4.3	Hidrolisis Protein .....	19
3.4.4	<i>Virtual screening</i> Sekuen Peptida .....	19
3.4.4.1	Skrining Kelarutan pada Sekuen Peptida .....	19
3.4.4.2	Skrining Sifat Alergen pada Sekuen Peptida .....	20
3.4.4.3	Skrining Toksisitas pada Sekuen Peptida .....	20
3.4.5	Analisis Sifat Mirip Obat .....	20
3.4.6	Prediksi Protein Target .....	20
3.4.7	Preparasi Protein Target dan Ligan .....	21
3.4.8	Penambatan Senyawa Uji ( <i>Molecular Docking</i> ) .....	21
3.4.9	Visualisasi Hasil <i>Docking</i> .....	22
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>		<b>23</b>
4.1	Pemilihan Sekuen Protein .....	23
4.2	Analisis Karakteristik Fisiko-Kimia Sekuen Protein .....	24
4.3	Hidrolisis Protein .....	29
4.4	Analisis Sifat Mirip Obat .....	33
4.5	<i>Virtual screening</i> Sekuen Peptida .....	38
4.6	Penentuan Protein Target .....	43
4.7	Preparasi Protein Target dan Ligan .....	46
4.8	<i>Molecular Docking</i> .....	48
<b>BAB V PENUTUP .....</b>		<b>57</b>
5.1	Kesimpulan .....	57
5.2	Saran .....	58

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>	<b>Halaman</b>
1. Hasil Karakteristik Fisiko-Kimia Sekuen Protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> ikan gabus .....	25
2. Hasil Karakteristik Fisiko-Kimia Sekuen Protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> ikan gabus.....	25
3. Komposisi Asam Amino Sekuen Protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i>	28
4. Komposisi Asam Amino Sekuen Protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> .....	28
5. Peptida hasil pemotongan protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> .....	30
6. Peptida hasil pemotongan protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> ..	32
7. Hasil analisis sifat mirip obat sekuens peptida dari protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> .....	34
8. Hasil analisis sifat mirip obat sekuens peptida dari protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> .....	35
9. Hasil <i>Virtual screening</i> Innovagen AB dan AllerTOP pada peptida protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> ikan gabus.....	38
10. Hasil <i>Virtual screening</i> Innovagen AB dan AllerTOP pada peptida protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> ikan gabus .....	39
11. Hasil <i>Virtual screening</i> ProTox-II pada peptida protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> ikan gabus .....	40
12. Hasil <i>Virtual screening</i> ProTox-II pada peptida protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> ikan gabus .....	41
13. Hasil <i>Virtual screening</i> pada peptida protein <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> ikan gabus .....	42
14. Hasil <i>Virtual screening</i> pada peptida protein <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> ikan gabus .....	42
15. Hasil <i>Molecular Docking</i> PPAR-delta .....	48

16. Hasil <i>Molecular Docking</i> glukokinase .....	50
17. Hasil <i>Molecular Docking</i> PPAR-delta dengan natif ligan .....	53
18. Hasil <i>Molecular Docking</i> glukokinase dengan natif ligan .....	54

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
1. Ikan <i>Channa striata</i> .....	5
2. Sitokrom c oksidase .....	8
3. Struktur miosin .....	9
4. Struktur asam amino .....	10
5. Pembentukan ikatan peptida .....	10
6. Sekuen protein dalam format FASTA <i>Cytochrome c oxidase subunit 1</i> dengan kode A0A0U1WLA1 .....	24
7. Sekuen protein dalam format FASTA <i>Cardiac muscle myosin heavy chain 6</i> dengan kode T1QW49 .....	24
8. Domain yang digunakan dalam set pelatihan model prediktif. ....	37
9. Struktur 3D Protein glukokinase .....	44
10. Struktur 3D Protein PPAR-delta .....	44
11. Protein target antidiabetes setelah dipreparasi PPAR-delta .....	46
12. Protein target antidiabetes setelah dipreparasi glukokinase .....	46
13. Ligan hasil preparasi IR .....	47
14. Ligan hasil preparasi ASSAVEAGAGTG .....	47
15. Ligan hasil preparasi EA .....	47
16. Ligan hasil preparasi GNAK .....	47
17. Ligan hasil preparasi QK.....	47
18. Ligan hasil preparasi QR.....	47
19. Ligan hasil preparasi AK.....	47
20. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan IR .....	51
21. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan ASSAVEAGAGTG 50	
22. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan EA.....	51
23. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan GNAK.....	51
24. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan QK.....	51
25. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan QR.....	51
26. Visualisai <i>molecular docking</i> antara PPAR-delta dengan AK. ....	51
27. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan IR .....	52

28. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan ASSAVEAGAGTG 52	
29. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan EA .....	52
30. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan GNAK .....	52
31. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan QK.....	52
32. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan QR.....	52
33. Visualisai <i>molecular docking</i> antara glukokinase dengan AK.....	53