

**PENAMBATAN SENYAWA YANG TERDAPAT DALAM
TANAMAN KEMRUNGGI (*Caesalpinia crista* L.) SEBAGAI
ANTIMALARIA**

SKRIPSI/KARYA TULIS ILMIAH

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

YUDI MULYADI

31115173



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN
BAKTI TUNAS HUSADA KOTA TASIKMALAYA**

2020

Abstrak

Malaria merupakan suatu penyakit yang disebabkan oleh Plasmodium sp. melalui perantara nyamuk Anopheles (Mutiah 2012). Dalam penelitian ini dilakukan penambatan senyawa yang terkandung dalam kemrunggi untuk dicari senyawa terbaik yang mempunyai potensi terhadap aktivitas sebagai obat antimalaria melalui metode docking. 68 senyawa uji dilakukan preparasi ligan dan penerapan aturan Lipinski's Rule of Five dengan menggunakan software MarvinSketch, prediksi ADME dan uji toksisitas dengan menggunakan PreADMET, proses docking menggunakan software Autodock. Hasil penelitian didapat 3 senyawa terbaik yaitu Caesalmin D; Caesalmin C; Norcawsalpin MC. Ketiga senyawa tersebut memiliki nilai binding affinity paling kecil dengan perbedaan nilai yang cukup signifikan dibandingkan dengan senyawa lainnya. Nilai binding affinity senyawa tersebut adalah -9,71; -9,67; -9,56 kkal/mol lebih rendah dari senyawa native ligan (-6,85 kkal/mol) dan senyawa obat pembanding kloroquin (-7,21 kkal/mol) yang berarti ketiga senyawa tersebut mempunyai interaksi yang lebih baik daripada senyawa nativ ligan dan pembandingnya. Senyawa tersebut telah di uji drug scan, PreAdme dan toksisitas hasilnya cukup baik dan memenuhi persyaratan yang telah ditentukan. Dengan demikian ketiga senyawa terbaik tersebut mempunyai potensi terhadap aktivitas sebagai obat antimalaria melalui penghambatan protein dan didukung oleh adanya ikatan hidrogen antara ligand dengan reseptor.

Kata kunci : *Caesalpinia crista* L., *Plasmodium* sp, Docking, Antimalaria

Abstract

Malaria is a disease caused by Plasmodium sp. through an Anopheles mosquito intermediary (Mutiah 2012). In this research, tethering of compounds contained in kemrunggi was carried out to find the best compound that has the potential for activity as an antimalarial drug through the docking method. 68 test compounds were carried out for ligand preparation and the application of the Lipinski's Rule of Five rule using MarvinSketch software, ADME prediction and toxicity testing using PreADMET, docking process using Autodock software. The results obtained by the 3 best compounds namely Caesalmin D; Caesalmin C; Norcaesalpin MC. The three compounds have the smallest binding affinity value with a significant difference in value compared to other compounds. The binding value of the compound's affinity is -9.71; -9.67; -9.56 kcal / mol lower than native ligand compound (-6.85 kcal / mol) and chloroquin comparative drug compound (-7.21 kcal / mol) which means the three compounds have better interactions than nativ ligand compounds and its comparison. These compounds have been tested for drug scans, PreAdme and the toxicity of the results is quite good and meets the specified requirements. Thus the three best compounds have the potential for activity as an antimalarial drug through protein inhibition and are supported by the presence of hydrogen bonds between ligands and receptors.

Keywords: Caesalpinia crista L., Plasmodium sp, Docking, Antimalaria

