

**STUDI *IN SILICO* AKTIVITAS PENGHAMBATAN XANTIN
OKSIDASE OLEH METABOLIT SEKUNDER PADA
SUBFRAKSI DAUN UBI JALAR (*Ipomoea batatas* L.)
VARIETAS UNGU-ORANYE**

SKRIPSI



**MUHAMMAD ISMAIL SABILUL HUDA
31121095**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2025**

**STUDI *IN SILICO* AKTIVITAS PENGHAMBATAN XANTIN
OKSIDASE OLEH METABOLIT SEKUNDER PADA
SUBFRAKSI DAUN UBI JALAR (*Ipomoea batatas* L.)
VARIETAS UNGU-ORANYE**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar Sarjana
Farmasi**



**MUHAMMAD ISMAIL SABILUL HUDA
31121095**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2025**

ABSTRAK

Studi *In Silico* Aktivitas Penghambatan Xantin Oksidase Oleh Metabolit Sekunder Pada Subfraksi Daun Ubi Jalar (*Ipomoea batatas* L.) Varietas Ungu-Oranye

Muhammad Ismail Sabilul Huda

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa fraksi ubi jalar (*Ipomoea batatas* L.) varietas ungu-oranye memiliki aktivitas penghambatan xantin oksidase. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui subfraksi dengan aktivitas penghambatan xantin oksidase terbaik secara *in vitro*, mengidentifikasi senyawa dalam subfraksi aktif, serta mengevaluasi senyawa paling potensial sebagai inhibitor xantin oksidase secara *in silico*. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah subfraksinasi, uji aktivitas secara *in vitro*, identifikasi senyawa dan studi *in silico*. Hasil penelitian menunjukkan subfraksi gabungan 3 merupakan subfraksi terbaik berdasarkan hasil rekapitulasi. Identifikasi senyawa menunjukkan terdapat 74 senyawa dalam subfraksi gabungan 3 dan hanya 8 senyawa yang terpilih untuk dilakukan uji aktivitas penghambatan terhadap enzim xantin oksidase melalui studi *in silico*. Hasil studi *in silico* *molecular docking* dan *molecular dynamics* menunjukkan senyawa cholest-4-en-3-one merupakan senyawa terbaik dengan nilai energi ikatan bebas sebesar -10,47 kkal/mol dengan nilai konstanta inhibisi sebesar 20,99 nM, serta menunjukkan kestabilan struktural tertinggi berdasarkan nilai RMSD dan RMSF. Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan menunjukkan bahwa senyawa cholest-4-en-3-one merupakan kandidat kuat sebagai penghambat xantin oksidase berdasarkan hasil *docking* dan kestabilan kompleks dalam simulasi *molecular dynamics*.

Kata Kunci: Xantin oksidase, *in silico*, *molecular docking*, *molecular dynamics*, ubi jalar, cholest-4-en-3-one

Abstract

Previous studies have shown that fractions of purple-orange sweet potato (*Ipomoea batatas* L.) exhibit xanthine oxidase inhibitory activity. This study aims to determine the most active subfraction in inhibiting xanthine oxidase *in vitro*, identify the compounds contained in the active subfraction, and evaluate the most potential compound as a xanthine oxidase inhibitor through *in silico* analysis. The methods used in this study include subfractionation, *in vitro* activity testing, compound identification, and *in silico* analysis. The results indicated that combined subfraction 3 was the most active based on the overall analysis. Compound identification revealed 74 compounds within the subfraction, of which 8 were selected for *in silico* xanthine oxidase inhibition testing. *In silico* studies using molecular docking and molecular dynamics simulation showed that cholest-4-en-3-one was the most promising compound, with a binding free energy of -10.47 kcal/mol and an inhibition constant of 20.99 nM. Additionally, this compound demonstrated the highest structural stability based on RMSD and RMSF values. Based on these findings, cholest-4-en-3-one is a strong candidate as a xanthine oxidase inhibitor, supported by its favorable docking results and complex stability in molecular dynamics simulation.

Keywords: Xanthine oxidase, *in silico*, molecular docking, molecular dynamics, sweet potato, cholest-4-en-3-one