

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DARI
SUBFRAKSI DAUN UBI JALAR UNGU-ORANYE (*Ipomoea
batatas* L.) SEBAGAI ANTIOKSIDAN**

SKRIPSI



RIZKI ABDUROCHMAN ASSIDIK

31121138

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

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DARI
SUBFRAKSI DAUN UBI JALAR UNGU-ORANYE (*Ipomoea
batatas* L.) SEBAGAI ANTIOKSIDAN**

SKRIPSI

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



RIZKI ABDUROCHMAN ASSIDIK

31121138

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

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa Metabolit Sekunder dari Subfraksi Daun Ubi Jalar Ungu-Oranye (*Ipomoea batatas* L.) sebagai Antioksidan

Rizki Abdurochman Assidik

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Penelitian terdahulu menunjukkan bahwa fraksi daun ubi jalar varietas ungu oranye memiliki aktivitas antioksidan yang baik. Penelitian ini bertujuan untuk melakukan subfraksinasi fraksi ubi jalar varietas ungu-oranye serta menguji potensi antioksidannya melalui pendekatan *in vitro* dan *in silico*. Uji *in vitro* dilakukan menggunakan metode DPPH, CUPRAC, dan FRAP. Hasil menunjukkan bahwa aktivitas antioksidan hanya terdeteksi pada metode DPPH, dengan nilai aktivitas berturut-turut: SFG1 sebesar 154,143±4,593 mg Asam Askorbat/g, SFG2 42,502±0,150 mg Asam Askorbat/g, SFG3 51,878±0,242 mg Asam Askorbat/g, SFG4 50,286±0,205 mg Asam Askorbat/g, dan SFG5 41,513±0,239 mg Asam Askorbat/g. Berdasarkan rekapitulasi skor, subfraksi gabungan 3 dipilih untuk dianalisis lebih lanjut menggunakan LC-MS/MS. Uji *in silico* dilakukan terhadap enzim NADPH oksidase (NOX) dan reseptor *Cyclooxygenase-2* (COX-2) menggunakan analisis *molecular docking* dan *molecular dynamics*. Hasil *docking* menunjukkan bahwa senyawa *Cholest-4-en-3-one*, *4-hydroxy-6-[2-(2-methyl-1,2,4a,5,6,7,8,8a-octahydronaphthalen-1-yl)ethyl]oxan-2-one*, dan *Tangeritin* memiliki afinitas ikatan paling rendah terhadap enzim NOX, dengan *Tangeritin* menunjukkan interaksi yang stabil pada analisis dinamika molekul. Pada reseptor COX-2, hasil menunjukkan senyawa yang sama, dengan *Cholest-4-en-3-one* memberikan stabilitas interaksi terbaik berdasarkan nilai RMSD dan RMSF. Analisis *drug scan*, farmakokinetik, dan toksisitas menunjukkan bahwa ketiga senyawa memenuhi karakteristik sebagai kandidat obat. Dengan demikian, ketiga senyawa tersebut memiliki potensi kuat sebagai agen antioksidan.

Kata Kunci : Antioksidan, *In Silico*, *In Vitro*, Subfraksi, Ubi jalar

Abstract

Previous studies have shown that the leaf fraction of purple-orange sweet potato varieties exhibits good antioxidant activity. This study aimed to perform subfractionation of the purple-orange sweet potato extract based on previous research and to evaluate its antioxidant potential through *in vitro* and *in silico* approaches. *In vitro* testing was conducted using DPPH, CUPRAC, and FRAP methods. Results showed antioxidant activity was only detected through the DPPH method, with activity values as follows: SFG1 at 154.143±4.593 mg Ascorbic Acid/g, SFG2 at 42.502±0.150 mg Ascorbic Acid/g, SFG3 at 51.878±0.242 mg Ascorbic Acid/g, SFG4 at 50.286±0.205 mg Ascorbic Acid/g, and SFG5 at 41.513±0.239 mg Ascorbic Acid/g. Based on the highest score, subfraction SFG3 was selected for further analysis using LC-MS/MS. The *in silico* study targeted NADPH Oxidase (NOX) and Cyclooxygenase-2 (COX-2) using molecular docking and molecular dynamics analysis. Docking results indicated that *Cholest-4-en-3-one*, *4-hydroxy-6-[2-(2-methyl-1,2,4a,5,6,7,8,8a-octahydronaphthalen-1-yl)ethyl]oxan-2-one*, and *Tangeretin* had the lowest binding affinities to NOX, with *Tangeretin* showing stable interactions based on dynamic analysis. Against COX-2 receptors, the three compounds also demonstrated low binding affinities, with *Cholest-4-en-3-one* exhibiting the most stable interaction based on RMSD and RMSF values. Drug scan, pharmacokinetics, and toxicity analysis revealed that all three compounds possess favorable characteristics as drug candidates. Thus, these compounds have strong potential as antioxidant agents.

Keywords : Antioxidant, *In Vitro*, *In Silico*, Subfraction, Sweet Potato