

Ridho Alfian R., 2020. **Studi Daya Ikat Senyawa-Senyawa dalam Ekstrak Etanol Daun Wungu (*Graptophyllum pictum* (L.) Griff) pada Reseptor Estrogen dengan *In silico***. Skripsi ini dibawah bimbingan Dr. Listijani Suhargo, M.Si.dan Prof. Dr. Sri Puji Astuti W., M.Si. Departemen Biologi, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya.

---

#### ABSTRAK

Daun wungu memiliki beberapa kandungan senyawa aktif antara lain steroid, tannin, flavonoid, saponin, dan alkaloid. Senyawa-senyawa tersebut dapat berperan sebagai fitoestrogen yang dapat berikatan dengan reseptor estrogen. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa-senyawa yang terkandung dalam daun wungu dan mengetahui besar energi ikat senyawa-senyawa tersebut dengan reseptor estrogen. Daun wungu di ekstrak menggunakan etanol 70%. Hasil ekstrak tersebut lalu diteliti dengan menggunakan metode *in silico*. Metode *in silico* merupakan sebuah metode yang berperan sebagai optimasi senyawa bioaktif dengan menggunakan model. Sebelumnya dilakukan uji terlebih dahulu menggunakan metode uji GC-MS (*Gas Chromatography-Mass Spectroscopy*). Setelah dilakukan uji GC-MS, didapatkan 12 senyawa yang terdapat dalam ekstrak etanol daun wungu antara lain seperti senyawa phytol, 1,4-Phthalazinedione, 1H-Pyrazol-5(4H)-one, 4H-1-Benzopyran-4-one, 2,3-dihydro-5,7-dihydroxy-2-phenyl, Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene), dll. Dari 12 senyawa tersebut masing-masing diminimasi menggunakan *software* PyRx sebelum di-*docking*. Protein yang digunakan dalam proses *docking* yaitu reseptor estrogen  $\alpha$  (2WKL) dan reseptor estrogen  $\beta$  (1IOL). Dari hasil *docking* tersebut didapatkan hasil berupa nilai energi ikat dari setiap senyawa dengan reseptor estrogen  $\alpha$  dan  $\beta$ . Senyawa yang memiliki nilai energi ikat terendah adalah senyawa 1H-Pyrazol-5(4H)-one, yaitu sebesar -4,5 kkal/mol. Sementara senyawa yang memiliki energi ikat tertinggi adalah senyawa 4H-1-Benzopyran-4-one, 2,3-dihydro-5,7-dihydroxy-2-phenyl, yaitu sebesar -9,0 kkal/mol yang termasuk ke dalam golongan senyawa flavonoid.

*Kata kunci : Daun wungu, in silico, Reseptor estrogen, Energi ikat*

Ridho Alfian R., 2020. **Study of The Binding Energy from Compounds in Ethanol Extract of Wungu Leaves (*Graptophyllum pictum* (L.) Griff) to Estrogen Receptors with *In silico* Method.** This thesis was under the guidance of Dr. Listijani Suhargo, M.Sc. and Prof. Dr. Sri Puji Astuti W., M.Si. Department of Biology, Faculty of Science and Technology, Airlangga University, Surabaya.

---

#### ABSTRACT

Wungu leaves contain several active compounds including steroids, tannins, flavonoids, saponins, and alkaloids. These compounds can act as phytoestrogens which can bind to estrogen receptors. This study aims to look at the compounds contained in wungu leaves and see the binding energy of these compounds with estrogen receptors. Wungu leaves were extracted using 70% ethanol. The extract results then examined using *in silico* method. The *in silico* method is a method that acts as an optimization for bioactive compounds. In the series, the test is carried out first using the GC-MS (Gas Chromatography-Mass Spectroscopy) test. After the GC-MS test, 12 compounds were found in the ethanol extract of wungu leaves, including phytol compounds, 1,4-Phthalazinedione, 1H-Pyrazol-5 (4H) -one, 4H-1-Benzopyran-4-one, 2,3-dihydro-5,7-dihydroxy-2-phenyl, Phenol, 4,4 '- (1-methylethylidene), etc. Each of the 12 compounds was minimized using PyRx *software* before *docking*. Proteins used in the *docking* process are  $\alpha$  estrogen receptors (2WKL) and  $\beta$  estrogen receptors (1IOL). From the *docking* results, the binding energy value of each compound with  $\alpha$  and  $\beta$  estrogen receptors was obtained. The compound with the lowest energy value is 1H-Pyrazol-5 (4H) -one, which is -4.5 kcal/mol. While the compound that has the highest binding energy is 4H-1-Benzopyran-4-one, 2,3-dihydro-5,7-dihydroxy-2-phenyl, which is -9.0 kcal/mol that is included in the flavonoids.

*Keywords* : Wungu leaves, *in silico*, Estrogen receptors, Binding energy

## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah Subhanahu Wata'ala yang telah melimpahkan karunia dan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan naskah skripsi yang berjudul “Studi Daya Ikat Senyawa-Senyawa dalam Ekstrak Etanol Daun Wungu (*Graptophyllum pictum* (L.) Griff) pada Reseptor Estrogen dengan *In silico*” dengan baik dan lancar.

Skripsi ini merupakan bagian dari payung penelitian yang dilakukan oleh Dr. Listijani Suhargo, M.Si. Penyusunan naskah skripsi ini bertujuan untuk memperluas wawasan serta sebagai syarat kelulusan pada program Strata-1 (S1) Biologi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Airlangga.

Penulis menyadari sepenuhnya bahwa naskah skripsi ini masih banyak kekurangan dan jauh dari sempurna. Oleh karena itu, saran dan kritik yang membangun dari berbagai pihak sangat diharapkan demi penyempurnaan naskah proposal skripsi ini. Semoga naskah skripsi ini dapat bermanfaat dan berguna bagi pengembangan ilmu pengetahuan.

Surabaya, 30 September 2020  
Penyusun,

Ridho Alfian Rachman

### UCAPAN TERIMA KASIH

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Tuhan Yang Maha Esa karena atas limpahan rahmat, nikmat, dan karunia-Nya lah skripsi yang berjudul “Studi Daya Ikat Senyawa-Senyawa dalam Ekstrak Etanol Daun Wungu (*Graptophyllum pictum* (L.) Griff) pada Reseptor Estrogen dengan *In silico*” ini dapat terselesaikan dengan baik. Terwujudnya skripsi ini tidak lepas dari bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terimakasih kepada :

1. Dr. Listijani Suhargo, M.Si. selaku pembimbing I sekaligus dosen wali yang telah memberikan kesempatan, nasihat, motivasi, bimbingan dan dukungan kepada penulis selama pengerjaan skripsi ini.
2. Prof. Dr. Sri Puji Astuti W., M.Si. selaku pembimbing II yang telah memberikan bimbingan dan pengarahan kepada penulis dalam pengerjaan skripsi ini.
3. Drs. Saikhu Akhmad Husen M.Kes. selaku penguji III yang telah memberikan saran dan arahan dalam perbaikan skripsi ini.
4. Dra. Thin Soedarti, CESA. selaku penguji IV yang telah memberikan saran dan arahan dalam perbaikan skripsi ini.
5. Prof. Win Darmanto, M.Si, Ph.D. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga.
6. Dr. Sucipto Hariyanto, DEA. selaku Ketua Departemen Biologi, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga.
7. Seluruh Dosen Biologi, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga yang telah membagikan ilmu dan pengalaman selama penulis menjalani studi.
8. Ayah, ibu, dan adik-adik penulis yang selalu memberikan dukungan serta doa selama penulis menjalani studi dan mengerjakan skripsi ini.
9. Sahabat penulis tercinta, Afinia, Pujo, dll
10. Teman-teman Biologi 2016 yang telah berbagi suka dan duka bersama selama masa perkuliahan.
11. Semua pihak yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan skripsi ini.

Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi penyusun pribadi dan pihak manapun terutama bagi kemajuan ilmu pengetahuan.