

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KANDUNGAN DARI  
CINNAMOMI CORTEX TERHADAP  
EPITOP *RESPIRATORY SYNCYTIAL VIRUS* (RSV)**



**MARISA CYNTIA WIBOWO  
2443018301**

**PROGRAM STUDI S1  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS KATOLIK WIDYA MANDALA SURABAYA  
2022**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KANDUNGAN DARI CINNAMOMI  
CORTEX TERHADAP  
EPITOP *RESPIRATORY SYNCYTIAL VIRUS* (RSV)**

**SKRIPSI**

Diajukan untuk memenuhi sebagian persyaratan  
memperoleh gelar Sarjana Farmasi Program Studi Strata 1  
di Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya

**OLEH :**

**MARISA CYNTIA WIBOWO**

**2443018301**

Telah disetujui pada tanggal 2 Juni 2022 dan dinyatakan LULUS

Pembimbing I




Dr. apt. Martha E. S.Si., M.Si.  
NIK. 241.98.0351

Pembimbing II



Dr. phill.nat.E. Catherina W.  
NIK. 241.97.0301

Mengetahui,  
Ketua Penguji



apt. Caroline, S.Si., M.Si.  
NIK. 241.00.044

**LEMBAR PERSETUJUAN  
PUBLIKASI KARYA ILMIAH**

Demi perkembangan ilmu pengetahuan, saya menyetujui skripsi/karya ilmiah saya, dengan judul : **Studi *In Silico* Senyawa Kandungan dari Cinnamomi Cortex terhadap Epitop Respiratory Syncytial Virus (RSV)** untuk dipublikasikan atau ditampilkan di internet atau media lain yaitu *Digital Library* Perpustakaan Unika Widya Mandala Surabaya untuk kepentingan akademik sebatas sesuai dengan Undang-Undang Hak Cipta. Demikian pernyataan persetujuan publikasi karya ilmiah ini saya buat dengan sebenarnya.

Surabaya, 2 Juni 2022



Marisa Cyntia Wibowo

2443018301

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa hasil tugas akhir ini adalah benar-benar merupakan hasil karya saya sendiri. Apabila di kemudian hari diketahui bahwa skripsi ini merupakan hasil plagiarisme, maka saya bersedia menerima sanksi berupa pembatalan kelulusan dan atau pencabutan gelar yang saya peroleh

Surabaya, 2 Juni 2022



Marisa Cyntia Wibowo

2443018301

## ABSTRAK

### STUDI *IN SILICO* SENYAWA KANDUNGAN DARI CINNAMOMI CORTEX TERHADAP EPITOP *RESPIRATORY SYNCYTIAL VIRUS* (RSV)

MARISA CYNTIA WIBOWO  
2443018301

Motavizumab merupakan imunoglobulin (IgG<sub>1</sub>) antibodi monoklonal rekombinan. Antibodi monoklonal ini banyak digunakan untuk mengobati penyakit yang disebabkan oleh *respiratory syncytial virus* (RSV). Antibodi ini mengikat protein RSV F yang berperan dalam perlekatan virus dan memediasi fusi. Ekstrak dari Cinnamomi Cortex diketahui dapat digunakan sebagai antivirus. Senyawa flavonoid salah satunya katekin memiliki potensi sebagai antivirus COVID-19. Salah satu senyawa dari ekstrak proantosianidin juga dikenal sebagai tanin terkondensasi yang memiliki aktivitas sebagai antivirus dengan menghambat infeksi SARS-CoV dan upregulasi. Dalam penelitian ini dilakukan uji *in silico* penambatan molekul pada 14 senyawa yang terkandung dari Cinnamomi Cortex terhadap epitop RSV. Hasil penelitian ini menunjukkan senyawa yang afinitas paling baik ( $\Delta G$ ), konstanta inhibisi ( $K_i$ ) terdapat pada 4 senyawa yaitu senyawa (+)-epikatekin memiliki nilai  $\Delta G$  -5,77 kkal/mol dan  $K_i$  59,43  $\mu M$ , beta-kariofilen memiliki nilai  $\Delta G$  -5,45 kkal/mol dan  $K_i$  100,45  $\mu M$ , (+)-katekin memiliki nilai  $\Delta G$  -5,17 kkal/mol dan  $K_i$  162,53  $\mu M$  dan (-)-katekin memiliki  $\Delta G$  -5,09 kkal/mol dan  $K_i$  186,98  $\mu M$ . Interaksi ikatan hidrogen pada residu asam amino THR108 dengan gugus hidroksil pada ketiga senyawa (+)-epikatekin, (+)-katekin, (-)-katekin. Interaksi ikatan hidrofobik pada residu asam amino PRO149 yang memiliki c alkil yang berikatan dengan c rangkap pada keempat senyawa (+)-epikatekin, beta-kariofilen, (+)-katekin, (-)-katekin.

**Kata kunci :** epitop RSV, Cinnamomi Cortex, *in silico*, afinitas ikatan, penambatan molekul.

## *ABSTRACT*

### **IN SILICO STUDY OF COMPOUNDS FROM CINNAMOMI CORTEX ON EPI TOPE *RESPIRATORY SYNCYTIAL VIRUS (RSV)***

**MARISA CYNTHIA WIBOWO  
2443018301**

Motavizumab is a recombinant immunoglobulin (IgG1) monoclonal antibody. This monoclonal antibody is widely used to treat diseases caused by respiratory syncytial virus (RSV). These antibodies bind to the RSV F protein, which plays a role in viral attachment and mediates fusion. Extracts from Cinnamomi Cortex are known to have antiviral properties. Flavonoid compounds, one of which is catechins, have potential as an antiviral for COVID-19. One of the compounds from the proanthocyanidin extract is also known as condensed tannin which has antiviral activity by inhibiting SARS-CoV infection and upregulation. In this study, an in silico molecular anchoring test was carried out on 14 compounds contained from Cinnamomi Cortex against the RSV epitope. The results of this study showed that the compound with the best affinity ( $\Delta G$ ), the inhibition constant ( $K_i$ ) was found in 4 compounds, namely the compound (+)-epicatechin which has an  $\Delta G$  of -5.77 kcal/mol and  $K_i$  of 59.43  $\mu M$ , beta-caryophyllene has an  $\Delta G$  of -5.45 kcal/mol and  $K_i$  of 100.45  $\mu M$ , (+)-catechins have an  $\Delta G$  of -5.17 kcal/mol and  $K_i$  162.53  $\mu M$  and (-)-catechins have an  $\Delta G$  -5.09 kcal/mol and  $K_i$  186.98  $\mu M$ . The interaction of hydrogen on the amino acid residue THR108 with the hydroxyl group on the three compounds (+)-epicatechin, (+)-catechin, (-)-catechin. Hydrophobic interactions on the amino acid residue PRO149 which have c alkyl bonds to the fourth c double of the four compounds (+)-epicatechin,  $\beta$ -karyophyllene, (+)-catechin, (-)-catechin.

**Keywords:** epitop RSV, Cinnamomi Cortex, in silico, bonding affinity, molecular anchoring.

## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan rahmat dan karunianya, sehingga skripsi dengan judul : **Studi *In Silico* Senyawa Kandungan dari Cinnamomi Cortex terhadap Epitop Respiratory Syncytial Virus (RSV)** dapat terselesaikan. Penyusunan skripsi ini dimaksudkan untuk memenuhi persyaratan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi di Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya. Penelitian ini bagian dari pengembangan Cinnamomi Cortex sebagai Obat Herbal Tradisional (OHT) antidiabetes dan imunostimulan-PPOT Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya 2021-2025.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini tidak dapat diselesaikan dengan baik tanpa ada bantuan, bimbingan, serta dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis ingin menyampaikan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada semua pihak yang telah membantu menyelesaikan pembuatan naskah skripsi ini, khususnya kepada :

1. Tuhan Yang Maha Esa atas berkat dan karunia-Nya yang luar biasa kepada penulis sehingga penulis bisa menyelesaikan tugas akhir hingga selesai.
2. apt. Drs. Kuncoro Foe, G.Dip. Sc., Ph.D., selaku rektor Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya atas kesempatan yang diberikan untuk menempuh pendidikan di Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.
3. apt. Sumi Wijaya, Ph.D., selaku Dekan Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya atas kesempatan yang diberikan untuk menempuh pendidikan di Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

4. apt. Diga Albrian Setiadi, S.Farm., M.Farm selaku Ketua Prodi Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya atas kesempatan yang diberikan untuk menempuh pendidikan di Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.
5. apt. Diga Albrian Setiadi, S.Farm., M.Farm selaku Penasehat Akademik yang senantiasa memberikan arahan mengenai program studi di Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.
6. Dr. apt. Martha Ervina, S.Si., M.Si. selaku dosen pembimbing I dan Dr.phill.nat.E. Catherina Widjajakusuma selaku dosen pembimbing II yang telah menyediakan waktu dan tenaga, serta dengan sabar membimbing, mengarahkan, serta memberi dorongan dan motivasi kepada penulis sehingga dapat menyelesaikan skripsi ini.
7. apt. Caroline, S.Si., M.Si. selaku dosen penguji I dan Yudi Tjahyono BSc., MSc.Biol selaku dosen penguji II yang banyak memberikan masukan dan saran yang membangun, membimbing, mengarahkan, memberikan pengetahuan serta memberi dorongan dan motivasi kepada penulis sehingga dapat menyelesaikan tugas akhir skripsi ini.
8. Seluruh dosen Fakultas Farmasi yang telah memberikan ilmu dan memberikan wawasan selama menempuh pendidikan di Fakultas Farmasi Widya Mandala Surabaya.
9. Semua petugas Tata Usaha dan petugas laboratorium yang telah membantu selama pendidikan di Fakultas Farmasi Widya Mandala Surabaya serta membantu dalam penyelesaian skripsi ini.
10. Seluruh dosen Fakultas Farmasi yang telah memberikan ilmu dan memberikan wawasan selama menempuh pendidikan di Fakultas Farmasi Widya Mandala Surabaya.



11. Orang tua saya Zillaini Nur Rodiyah, Bambang Wibowo, dan seluruh keluarga besar tercinta yang selalu menemani, memberikan dukungan, semangat, doa dan kasih sayang yang teramat besar sehingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik dan lancar.
12. Partner Skripsi *molecular docking* yaitu Christine dan Rachmaudina yang telah berjuang bersama saling membantu dan memberikan semangat dalam menyelesaikan skripsi *molecular docking*. Dan teman-teman seperjuangan Farmasi Angkatan 2018 yang tidak bisa penulis tuliskan satu persatu. Terima kasih untuk dukungan dan saran sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dengan baik.

Dengan keterbatasan pengalaman, pengetahuan maupun pustaka yang ditinjau, penulis menyadari kekurangan dalam penulisan naskah skripsi ini. Akhir kata penulis sangat mengharapkan kritik dan saran agar naskah skripsi ini dapat lebih disempurnakan.

Surabaya, 2 Juni 2022

Penulis

## DAFTAR ISI

	<b>Halaman</b>
ABSTRAK.....	ii
<i>ABSTRACT</i> .....	iii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI .....	vi
DAFTAR TABEL .....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN .....	x
BAB 1. PENDAHULUAN.....	1
1.1    Latar Belakang.....	1
1.2    Rumusan Masalah.....	4
1.3    Tujuan Penelitian .....	4
1.4    Manfaat Penelitian .....	4
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA .....	5
2.1    Tinjauan tentang Tanaman Kayu Manis .....	5
2.1.1    Kandungan Tanaman Kayu Manis .....	5
2.1.2    Khasiat Tanaman Kayu Manis.....	6
2.2    Tinjauan Reseptor.....	8
2.2.1    Tinjauan Epitop RSV.....	8
2.2.2    Jenis Ikatan Obat dan Reseptor.....	14
2.3    Tinjauan tentang Metode in Silico.....	16
2.3.1    Definisi Metode in Silico.....	16
2.3.2    Perangkat Lunak Penambatan Molekul .....	18
BAB 3. METODE PENELITIAN .....	23
3.1    Waktu dan Tempat Penelitian .....	23
3.2    Instrumen Penelitian .....	23
3.2.1    Alat .....	23

	<b>Halaman</b>
3.2.2	Bahan..... 23
3.3	Variabel Penelitian ..... 27
3.4	Tahapan Penelitian ..... 27
3.4.1	Pencarian dan Pengunduhan Struktur Tiga Dimensi (3D) Makromolekul Epitop RSV..... 27
3.4.2	Preparasi Target dari Epitop RSV ..... 27
3.4.3	Pengunduhan Senyawa Ligan Kandungan dari Cinnamomi Cortex ..... 28
3.4.4	Preparasi Senyawa Ligan Kandungan dari Cinnamomi Cortex ..... 28
3.4.5	Menentukan dan Menjalankan Parameter Autogrid ..... 29
3.4.6	Menyiapkan Parameter dan Menjalankan Penambatan Molekul ..... 29
3.4.7	Analisis Data ..... 29
3.4.8	Visualisasi ..... 30
3.5	Skema Kerja Penelitian..... 31
<b>BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN ..... 32</b>	
4.1	Hasil..... 32
4.1.1	Penambatan Molekul ..... 32
4.1.2	Visualisasi hasil penambatan molekul..... 34
4.2	Pembahasan ..... 35
<b>BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN ..... 39</b>	
5.1	Kesimpulan..... 39
5.2	Saran ..... 40
<b>DAFTAR PUSTAKA ..... 41</b>	

## DAFTAR TABEL

	<b>Halaman</b>
Tabel 2.1	Macam-macam perangkat lunak untuk uji <i>in silico</i> ..... 22
Tabel 3.1	Struktur 3D 14 senyawa ligan Cinnamomi Cortex yang diperoleh dari PubChem ..... 25
Tabel 3.2	Lanjutan struktur 3D 14 senyawa ligan Cinnamomi Cortex yang diperoleh dari PubChem..... 26

## DAFTAR GAMBAR

	<b>Halaman</b>
Gambar 2.1	Struktur tiga dimensi (3D) epitop RSV berikatan dengan motavizumab Fab dengan PDB ID : 3QWO ..... 13
Gambar 3.1	Struktur 3D epitop RSV beserta ligan SO4 (oranye) dan EDO (biru) ..... 24
Gambar 3.2	Skema penelitian ..... 31
Gambar 4.1	Visualisasi hasil penambatan molekul (a) struktur 3D sisi aktif pengikatan dan (b) 2D ikatan hidrofobik residu ALA10, PRO149 ..... 34
Gambar 4.2	Visualisasi hasil penambatan molekul (a) struktur 3D sisi aktif pengikatan dan (b) 2D ikatan hidrofobik residu PRO149, ALA10, LYS201 ..... 34
Gambar 4.3	Visualisasi hasil penambatan molekul (a) struktur 3D sisi aktif pengikatan dan (b) 2D ikatan hidrofobik residu ALA10, PRO149 ..... 35
Gambar 4.4	Visualisasi hasil penambatan molekul (a) struktur 3D sisi aktif pengikatan dan (b) 2D ikatan hidrofobik residu LYS201, PRO149 ..... 35

## DAFTAR LAMPIRAN

	<b>Halaman</b>
LAMPIRAN 1 Visualisasi hasil penambatan molekul.....	50