

**ANALISIS KROMATOGRAFI GAS-SPEKTROMETRI MASSA
SENYAWA KIMIA DARI FRAKSI N-HEKSANA DAN KLOOROFORM
HERBA ECENG GONDOK (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms) DAN
DOKING MOLEKULER TERHADAP ENZIM DNA TOPOISOMERASE**



SKRIPSI

**ARUMSARI REDHIYANINGSIH
1408010021**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PURWOKERTO
2018**

**ANALISIS KROMATOGRAFI GAS-SPEKTROMETRI MASSA
SENYAWA KIMIA DARI FRAKSI N-HEKSANA DAN KLOOROFORM
HERBA ECENG GONDOK (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms) DAN
DOKING MOLEKULER TERHADAP ENZIM DNA TOPOISOMERASE**



SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat
untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

**ARUMSARI REDHIYANINGSIH
1408010021**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PURWOKERTO
2018**

HALAMAN PERSETUJUAN

**ANALISIS KROMATOGRAFI GAS-SPEKTROMETRI MASSA SENYAWA
KIMIA DARI FRAKSI N-HEKSANA DAN KLOOROFORM HERBA ECENG
GONDOK (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms) DAN DOKING MOLEKULER
TERHADAP ENZIM DNA TOPOISOMERASE**

Arumsari Redhiyaningsih

1408010021

Diperiksa dan disetujui oleh

Pembimbing I



Dr. Diniatik, M.Sc., Apt.

NIK. 2160310

Pembimbing II



Dr. Asmiyenti Djaliasrin Djali, M.Si.

NIP. 197405222000122001

HALAMAN PENGESAHAN


ANALISIS KROMATOGRAFI GAS-SPEKTROMETRI MASSA
SENYAWA KIMIA DARI FRAKSI N-HEKSANA DAN KLOOROFORM
HERBA ECENG GONDOK (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms) DAN
DOKING MOLEKULER TERHADAP ENZIM DNA TOPOISOMERASE

Arumsari Redhiyaningsih


1408010021


Telah dipertahankan di depan Panitia Ujian Skripsi

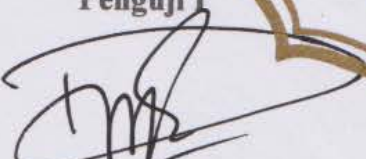
Pada hari tanggal 10 Agustus 2018




SUSUNAN PANITIA

Ketua

Dr. Pri Iswati Utami, M.Si., Apt
NIK. 2160218

Sekretaris

Ika Nurziah, M.Sc., Apt
NIK.2160747

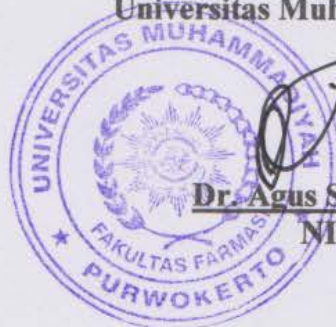
Penguji I

Dr. Diniatik, M.Sc., Apt
NIK. 2160310

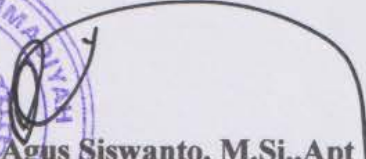
Penguji II

Dr. Asmiventi Djaliasrin Djalil, M.Si
NIP. 197405222000122001

Mengetahui

Dekan Fakultas Farmasi

Universitas Muhammadiyah Purwokerto




Dr. Agus Siswanto, M.Si., Apt
NIK. 2160309

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Arumsari Redhiyaningsih
NIM : 1408010021
Program Studi : S1 Farmasi
Fakultas : Farmasi
Perguruan Tinggi : Universitas Muhammadiyah Purwokerto,

menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa skripsi ini adalah hasil karya saya dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk telah saya nyatakan dengan benar serta bukan hasil penjiplakan dari karya orang lain.

Demikian pernyataan ini saya buat dan apabila kelak dikemudian hari terbukti ada unsur penjiplakan, saya bersedia mempertanggungjawabkan sesuai dengan ketentuan yang berlaku.

Purwokerto, Agustus 2018

Yang membuat pernyataan,



Arumsari Redhiyaningsih

Analisis Kromatografi Gas-Spektrometri Massa Senyawa Kimia Dari Fraksi N-Heksana dan Kloroform Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms) dan Doking Molekuler Terhadap Enzim DNA Topoisomerase

Arumsari Redhiyaningsih¹, Diniatik², Asmiyenti Djaliasrin Djaliil²

ABSTRAK

Kanker merupakan tumor yang membahayakan (malignant tumor). Penyakit kanker timbul akibat pertumbuhan sel pada jaringan tubuh yang tidak normal. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui kandungan senyawa kimia dari fraksi n-heksana dan kloroform eceng gondok (*Eichhornia crassipes*) dan mengetahui interaksi antara senyawa kimia dari fraksi n-heksana dan kloroform eceng gondok dengan enzim DNA topoisomerase sebagai reseptor dengan doking molekuler. Penelitian dilakukan dengan fraksinasi kemudian dianalisis menggunakan GC-MS dan komputasi kimia yaitu doking molekuler. Hasil GC-MS mengidentifikasi sejumlah komponen senyawa kimia pada fraksi n-heksana yaitu, 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; acetic acid, hydrazide; hydrazine, (1,1-dimethylethyl); hydroperoxide, 1-ethylbutyl; dan hydroperoxide, 1-methylpentyl; serta pada fraksi kloroform yaitu, 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; 2-oxazolidinethione, 5-[2-(methylthio)ethyl]; carbamic acid, methyl ester; (Z)-1-(ethoxycarbonyl-1-fluoro-2-(methoxycarbonyl)-1,3-butadiene; dan carbamic acid, methyl ester. Validasi metode menunjukkan nilai RMSD <2,5 Å dan hasil doking ligan uji terhadap enzim DNA topoisomerase pada fraksi n-heksana menunjukkan senyawa 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; dan acetic acid, hydrazide memiliki energi ikatan terkecil. Sedangkan pada fraksi kloroform senyawa yang menunjukkan energi ikatan terkecil adalah 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; dan carbamic acid, methyl ester. Akan tetapi, senyawa pada kedua fraksi menunjukkan tidak adanya ikatan dengan enzim DNA topoisomerase.

Kata kunci: herba eceng gondok (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms), fraksi n-heksana dan kloroform, doking molekuler

Analysis Gas Chromatography-Mass Spectrometry of Chemical Compounds
From the N-hexane and Chloroform Fraction of Eceng Gondok Herb (*Eichhornia
crassipes* (Mart.) Solms) and Molecular Docking Analysis against DNA Enzyme
Topoisomerase

Arumsari Redhiyaningsih¹, Diniatik², Asmiyenti Djaliasrin Djaliil²

ABSTRACT

Cancer are caused by abnormalities in the genetic material of the transformed cells. The study aims to analyze active the chemical compounds from the n-hexane and chloroform fractionates of eceng gondok and to know the interaction between the compounds a target with DNA enzyme topoisomerase as receptor with molecular docking. The compounds analysis was carried out by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). GC-MS analysis showed various compounds are present in the n-hexane fraction, comprising 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; acetic acid, hydrazide; hydrazine, (1,1-dimethylethyl); hydroperoxide, 1-ethylbutyl; dan hydroperoxide, 1-methylpentyl. Whereas, in the chloroform fractions 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; 2-oxazolidinethione, 5-[2-(methylthio)ethyl]; carbamic acid, methyl ester; (Z)-1-(ethoxycarbonyl-1-fluoro-2-(methoxycarbonyl)-1,3-butadiene; and carbamic acid, methyl ester were found. The method validation showed RMSD value of <2.5 Å, the ligand binding interactions showed that 2-pyridinepropanoic acid, .alpha.-methyl-.beta.-oxo-, ethyl ester; acetic acid, hydrazide and carbamic acid, methyl ester from n-hexane and chloroform had a lowest energy binding. However, the compound from the n-hexane and chloroform fractions showed no apparent interaction with DNA topoisomerase.

Keywords: eceng gondok herb (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms), n-hexane and chloroform fraction, molecular docking

Halaman Persembahan

Dengan penuh cinta kasih, penulis mempersembahkan skripsi ini kepada Allah SWT yang telah memberikan keberkahan dalam segala hal kepada penulis.

Penulis mempersembahkan skripsi ini kepada kedua orang tua penulis yang telah bekerja keras dalam memberikan yang terbaik dalam segala hal kepada penulis. Kepada kakak penulis yang sedang berjuang bersama, semoga menikmati setiap proses yang dijalani dengan penuh rasa syukur.

Penulis juga mempersembahkan skripsi ini kepada teman-teman Fakultas Farmasi angkatan 2014, semoga semua hal baik yang didapat dapat disalurkan dan dibagikan untuk hal-hal yang baik juga.



Motto

*Berangkat dengan penuh keyakinan, berjalan dengan penuh keikhlasan,
istiqomah dalam menghadapi cobaan*

*Hai orang-orang yang beriman, jadikanlah sabar dan shalatmu sebagai
penolongmu, sesungguhnya Allah bersama orang-orang yang sabar (Q.S. Al-
Baqarah: 153)*

*Barang siapa yang bersungguh sungguh, sesungguhnya kesungguhan tersebut
untuk kebaikan dirinya sendiri (Q.S. Al-Ankabut: 6)*

*Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai kesanggupannya (Q.S. Al-
Baqarah: 286)*

*Waktu bagaikan pedang. Jika engkau tidak memanfaatkannya dengan baik (untuk
memotong), maka ia akan memanfaatkanmu (dipotong) (HR. Muslim)*



KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas berkat dan rahmat-Nya, dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul Analisis Kromatografi Gas-Spektrometri Massa Senyawa Kimia Dari Fraksi N-Heksana Dan Kloroform Herba Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms) Dan Doking Molekuler Terhadap Enzim DNA Topoisomerase. Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Muhammadiyah Purwokerto.

Penulis menyadari bahwa tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, dari masa perkuliahan sampai pada penyusunan skripsi ini, sangatlah sulit untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu pada kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada yang terhormat:

- (1) Dr. H. Syamsuhadi Irsyad, S.H.,M.H., selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Purwokerto
- (2) Dr. Agus Siswanto, M.Si.,Apt., selaku Dekan Farmasi yang telah memberi berbagai informasi dan bimbingan tentang tata laksana penyusunan skripsi;
- (3) Wahyu Utaminingsrum, M.Sc.,Apt., selaku Ketua Program Studi S1 Farmasi yang telah memberi berbagai informasi dan bimbingan tentang tata laksana penyusunan skripsi;
- (4) Dr. Diniatik, M.Sc.,Apt dan Dr. Asmiyenti Djaliasrin Djalil, M.Si., selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan dalam penyusunan skripsi ini;
- (5) Dr. Pri Iswati Utami, M.Si.,Apt., yang telah memberikan berbagai pertanyaan untuk menguji kelayakan sebagai sarjana Farmasi;
- (6) Ika Nurziah, M.Sc.,Apt., yang telah memberikan berbagai pertanyaan untuk menguji kelayakan sebagai sarjana Farmasi;
- (7) Bapak dan ibu serta saudara tercinta yang telah memberikan bantuan dan dukuan baik material maupun moral.

Akhir kata, semoga Allah SWT memberikan balasan atas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi pengembangan ilmu. Aamiin.

Purwokerto, Agustus 2018

Penulis

Arumsari Redhiyaningsih

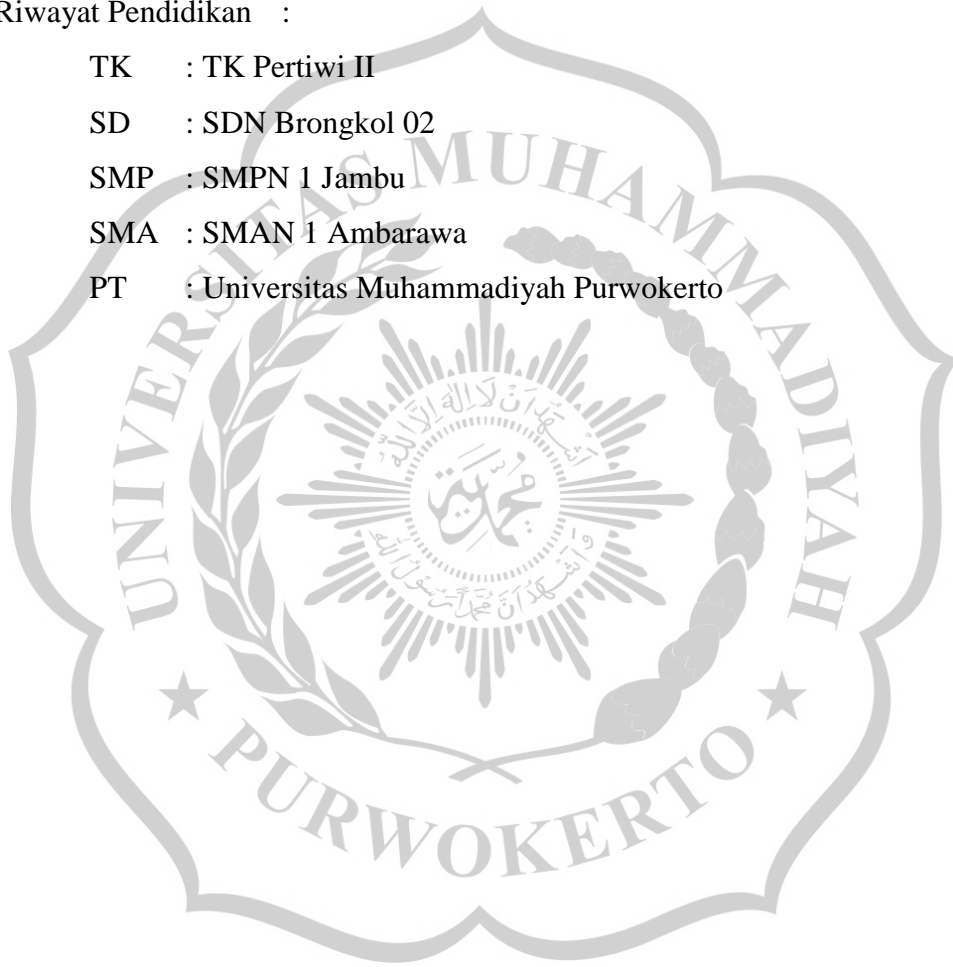


Riwayat Hidup

Nama : Arumsari Redhiyaningsih
Tempat, tanggal lahir : Kab. Semarang, 06 Maret 1996
Nama Bapak : Ruwet Tambeng
Nama Ibu : Sumegawati
Nama Kakak : Eka Retnowati

Riwayat Pendidikan :

TK : TK Pertiwi II
SD : SDN Brongkol 02
SMP : SMPN 1 Jambu
SMA : SMAN 1 Ambarawa
PT : Universitas Muhammadiyah Purwokerto



DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PERSETUJUAN.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS.....	iv
ABSTRAK.....	v
<i>ABSTRACT</i>	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	vii
MOTTO.....	viii
KATA PENGANTAR.....	ix
RIWAYAT HIDUP.....	xi
DAFTAR ISI.....	xii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
DAFTAR TABEL.....	xv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xvi
BAB I. PENDAHULUAN	
A. Latar Belakang Masalah.....	1
B. Perumusan Masalah.....	3
C. Tujuan Penelitian.....	3
D. Manfaat Penelitian.....	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	
A. Hasil Penelitian Terdahulu.....	4
B. Landasan Teori.....	5
1. Kanker.....	5
2. Eceng gondok (<i>Eichhornia crassipes</i>).....	7
3. Ekstraksi.....	9
4. GC-MS.....	10
5. Doking molekuler.....	11
C. Kerangka Konsep.....	12
D. Hipotesis.....	13

BAB III. METODE PENELITIAN

A. Jenis dan Rancangan Penelitian	14
B. Variabel Penelitian	14
C. Waktu dan Tempat Penelitian	14
D. Bahan dan Alat	14
E. Prosedur Penelitian.....	15
F. Analisis.....	18

BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

A. Hasil Determinasi Tumbuhan	19
B. Penyiapan Serbuk Tumbuhan	19
C. Hasil Fraksinasi Ekstrak Etanol Eceng Gondok	19
D. Hasil GC-MS.....	22
E. Doking Molekuler	28

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan	38
B. Saran.....	38

DAFTAR PUSTAKA	39
-----------------------------	-----------

LAMPIRAN.....	41
----------------------	-----------

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 Reaksi oleh enzim DNA topoisomerase tipe II.....	6
Gambar 2.2 Tumbuhan Eceng Gondok.....	7
Gambar 4.1 Proses penyarian dengan metode sokhletasi	20
Gambar 4.2 Proses penguapan menggunakan <i>waterbath</i> dan hasil ekstrak kental ekstrak etanol eceng gondok.....	21
Gambar 4.3 Hasil fraksinasi n-heksana ekstrak etanol eceng gondok dan hasil penguapan.	22
Gambar 4.4 Hasil fraksinasi kloroform ekstrak etanol eceng gondok dan hasil penguapan	22
Gambar 4.5 Kromatogram fraksi n-heksana ekstrak etanol eceng gondok	23
Gambar 4.6 Kromatogram fraksi kloroform ekstrak etanol eceng gondok	26
Gambar 4.7 Visualisasi layar situs pencarian enzim DNA topoisomerase	30
Gambar 4.8 Visualisasi rantai pada molekul DNA topoisomerase sebelum dipreparasi (www.rscb/pdb.com)	31
Gambar 4.9 Visualisasi struktur DNA topoisomerase	32
Gambar 4.10 Visualisasi <i>binding site</i> asam amino pada hasil validasi metode.....	35
Gambar 4.11 Hasil doking senyawa ligan uji dengan enzim DNA topoisomerase.....	37

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 4.1 Waktu retensi, komponen, rumus kimia, berat molekul, peak area %, dan <i>similiary index</i> fraksi n-heksana ekstrak etanol eceng gondok.....	24
Tabel 4.2 Waktu retensi, komponen, rumus kimia, berat molekul, peak area %, dan <i>similiary index</i> fraksi kloroform ekstrak etanol eceng gondok.....	27
Tabel 4.3 Senyawa yang telah dioptimasi menggunakan Gaussian 03W dengan metode DFT	29
Tabel 4.4 Parameter <i>Grid box</i>	33
Tabel 4.5 RMSD validasi metode	34
Tabel 4.6 Hasil doking senyawa uji fraksi n-heksana terhadap enzim DNA topoisomerase.....	36
Tabel 4.7 Hasil doking senyawa uji fraksi kloroform terhadap enzim DNA topoisomerase	36

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1. Hasil determinasi tumbuhan	41
Lampiran 2. Hasil GC-MS Fraksi N-heksana	43
Lampiran 3. Hasil GC-MS Fraksi Kloroform	74
Lampiran 4. Daftar <i>official codes</i> dua puluh asam amino	105
Lampiran 5. Data energi hasil doking	106

