

**STUDI *IN SILICO* PREDIKSI BIOAVAILABILITAS,  
TOKSISITAS, DAN AKTIVITAS SENYAWA BUNGA TELANG  
SEBAGAI ANTIKETOMBE**

**KARYA TULIS ILMIAH**



Oleh :

**PUTRI FEBRIANA**

**22.02.05.0424**

**PROGRAM STUDI D3 FARMASI  
FAKULTAS ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH LAMONGAN  
2025**

## ABSTRAK

Putri Febriana.2025. **Studi In Silico Prediksi Bioavailabilitas Toksisitas dan Aktivitas Senyawa Bunga Telang Sebagai Antiketombe.** Karya Tulis Ilmiah Program Studi D3 Farmasi Universitas Muhammadiyah Lamongan. Pembimbing (1) apt. Safira Yulita Fazadini.,M.Farm, (2) apt. Elasari Dwi Pratiwi.,M.Farm.

Ketombe merupakan penyakit yang disebabkan oleh jamur *Candida albicans*. Ketombe, ditandai oleh sisik yang berlebihan pada kulit kepala, berwarna putih keabu-abuan yang tersebar pada rambut, terkadang disertai rasa gatal. Ketombe mempengaruhi sekitar 50% populasi dunia, dengan Indonesia menempati urutan keempat dalam prevalensi kasus ketombe. Indonesia memiliki iklim tropis yang menyebabkan lembab, sehingga mempermudah pertumbuhan jamur *Candida albicans*. Salah satu senyawa yang dapat dimanfaatkan sebagai antijamur adalah bunga telang. Pada penelitian ini telah dilakukan metode *In silico* dengan *molecular docking*. Studi ini bertujuan untuk melihat potensi senyawa bunga telang sebagai agen antiketombe. Senyawa yang dihasilkan dianalisis lebih lanjut menggunakan metode *in silico* untuk memprediksi bioavailabilitas, toksisitas, dan aktivitas antiketombe. Hasil penelitian ini merujuk dari *Journal of Functional Food* hasil skrining fitokimia bunga telang dengan metode HPLC menunjukkan bahwa bunga telang mengandung senyawa aktif seperti *Quercetin*, *Kaempferol*, *Myricetin*, *Rutin*, *Epicatechin*, *Delphinidin*, *Gallic Acid*, *Protocatechuic acid*, dan *Chlorogenic Acid*. Prediksi bioavailabilitas menunjukkan bahwa terdapat beberapa senyawa yang memiliki nilai yang baik. Uji toksisitas menunjukkan sebagian besar senyawa tidak memiliki efek toksik signifikan. Uji aktivitas menunjukkan bahwa senyawa rutin memiliki ikatan yang lebih kuat dengan reseptor *Candida albicans* dibandingkan dengan obat *ketokonazole*. Penelitian ini menunjukkan potensi senyawa dari bunga telang sebagai antiketombe yang efektif dan aman.

**Kata kunci :** Antiketombe *In Silico*, Bunga Telang

## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT, karena berkat rahmat dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan Karya Tulis Ilmiah yang berjudul “ **Studi *In Silico* Prediksi Bioavailabilitas Toksisitas dan Aktivitas Senyawa Bunga Telang Sebagai Antiketombe** “ sesuai waktu yang ditentukan.

Karya Tulis Ilmiah ini penulis susun sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar Ahli Madya Farmasi di Universitas Muhammadiyah Lamongan dalam penyusunan Karya Tulis Ilmiah ini penulis mendapatkan banyak pengarahan dan bantuan dari berbagai pihak, untuk itu penulis tidak lupa mengucapkan terima kasih kepada yang terhormat Bapak/Ibu:

1. Prof. Dr. Abdul Aziz Alimul Hidayat, S. Kep., Ners., M. Kes, selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Lamongan.
2. Dr. Virgianti Nur Faridah, S. Kep., Ners., M. Kes, selaku Dekan Fakultas Ilmu Kesehatan Universitas Muhammadiyah Lamongan.
3. apt. Sri Bintang Sahara Mahaputra Kusuma Negara, M. Farm, selaku Ketua Program Studi D3 Farmasi Universitas Muhammadiyah Lamongan.
4. apt. Safira Yulita Fazadini.,M.Farm, selaku Pembimbing I, yang telah banyak memberikan petunjuk saran selama penyusunan.
5. apt. Elasari Dwi Pratiwi.,M.Farm, selaku Pembimbing II, yang telah banyak memberikan petunjuk saran selama penyusunan.
6. Segenap Bapak dan Ibu civitas akademik pada Program Studi D3 Farmasi Fakultas Ilmu Kesehatan Universitas Muhammadiyah Lamongan atas ilmu yang telah diberikan kepada penulis.

Semoga Allah SWT memberi balasan pahala atas semua amal kebaikan yang diberikan. Penulis menyadari karya tulis ilmiah ini masih banyak kekurangan, untuk itu segala kritik dan saran yang bersifat membangun sangat penulis harapkan, akhirnya penulis berharap semoga Karya Tulis Ilmiah ini bermanfaat bagi penulis pada khususnya dan bagi semua pembaca pada umumnya.

Lamongan, 27 Mei 2025



**PUTRI FEBRIANA**  
**NIM.22.02.05.0424**



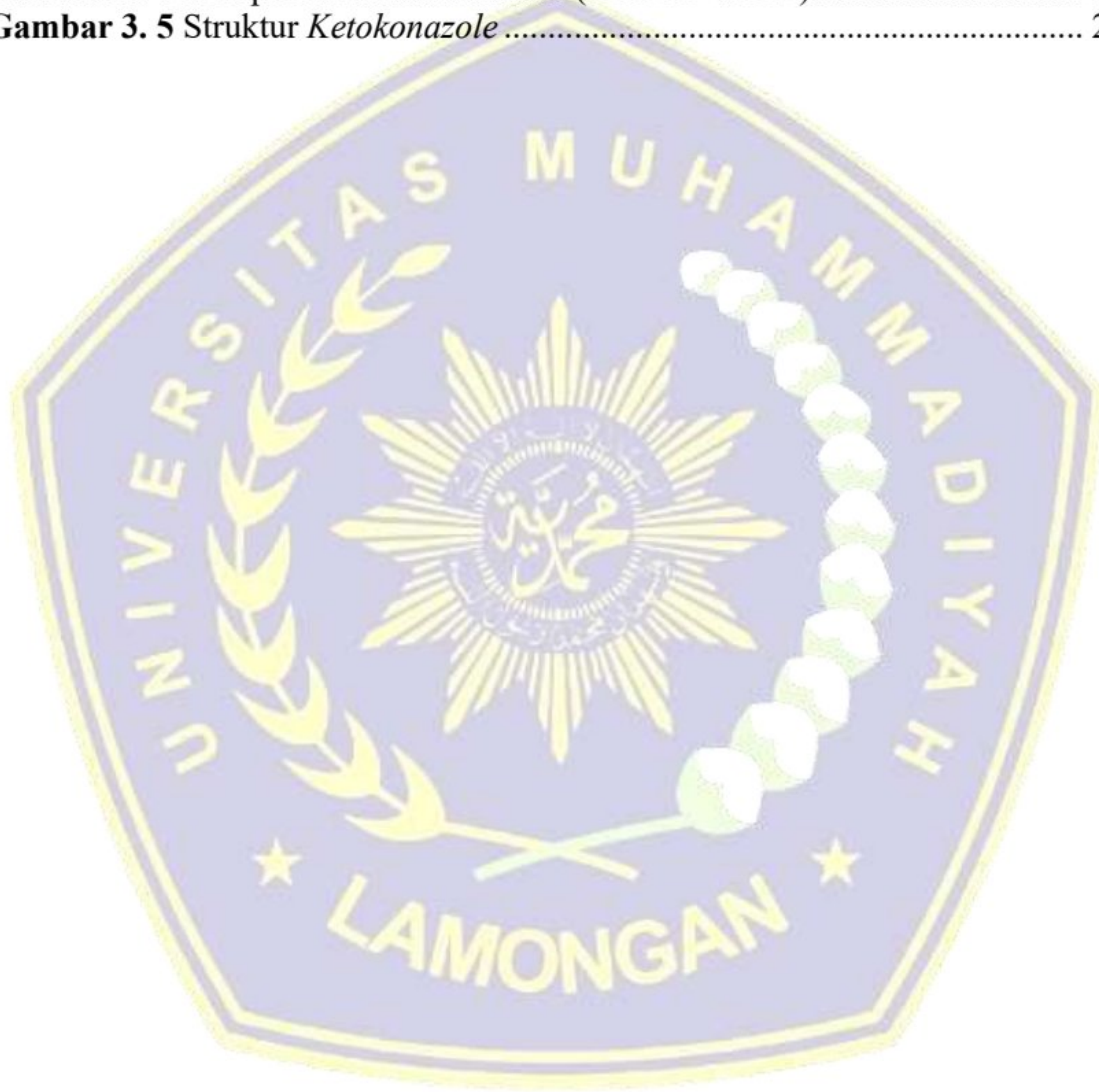
## DAFTAR ISI

<b>KARYA TULIS ILMIAH</b> .....	<b>i</b>
<b>SURAT PERNYATAAN</b> .....	<b>ii</b>
<b>LEMBAR PERSETUJUAN</b> .....	<b>iii</b>
<b>LEMBAR PENGESAHAN</b> .....	<b>iv</b>
<b>CURRICULUM VITAE</b> .....	<b>v</b>
<b>MOTTO</b> .....	<b>vi</b>
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>viii</b>
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	<b>ix</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xiv</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	<b>xv</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	4
1.3 Tujuan Penelitian.....	4
1.4 Manfaat Penelitian .....	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>	
2.1 Tanaman Bunga Telang ( <i>Clitoria ternatea L.</i> ) .....	6
2.1.1 Klasifikasi Tanaman Bunga Telang ( <i>Clitoria Ternatea L.</i> )... 7	
2.1.2 Senyawa Metabolit Sekunder dari <i>Journal of Functional Food</i> .....	7
2.2 Penyebab dan Mekanisme Terjadinya Ketombe .....	8
2.3 Definisi Jamur .....	10
2.4 Faktor-Faktor Pertumbuhan Jamur.....	10
2.5 Morfologi dan Struktur Jamur <i>Candida Albicans</i> .....	11
2.6 Infeksi yang Disebabkan <i>Candida albicans</i> .....	11
2.7 Pengobatan Ketombe .....	12
2.8 Definisi dan Mekanisme Obat <i>Ketokonazole</i> .....	13
2.9 Prediksi Bioavailabilitas, Toksisitas, dan Aktivitas Senyawa Bunga Telang.....	13
2.9.1 Prediksi Bioavailabilitas .....	13
2.9.2 Prediksi Toksisitas .....	14

2.9.3 Prediksi Aktivitas .....	15
2.10 Kerangka Konsep Penelitian.....	17
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	
3.1 Desain Penelitian.....	18
3.2 Tempat dan Waktu Penelitian.....	18
3.3 Kerangka Kerja .....	19
3.3.1 Prediksi Bioavailabilitas.....	19
3.3.2 Prediksi Toksisitas.....	20
3.3.3 Prediksi Aktivitas .....	21
3.4 Sampel Penelitian.....	22
3.4.1 Populasi Penelitian.....	22
3.4.2 Sampel Penelitian .....	22
3.4.3 Teknik Penelitian.....	22
3.5 Identifikasi Variabel .....	22
3.6 Definisi Operasional Variabel .....	23
3.7 Prosedur Kerja.....	24
3.7.1 Prediksi Bioavailabilitas.....	24
3.7.2 Prediksi Toksisitas.....	24
3.7.3 <i>Docking Molekuler</i> atau Aktivitas.....	25
3.8 Instrumen Penelitian.....	25
3.9 Analisis Data Penelitian .....	26
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	
4.1 Hasil Penelitian .....	28
4.1.1 Penyiapan Struktur Molekul Reseptor.....	28
4.1.2 Preparasi Ligan .....	28
4.1.3 Hasil Prediksi Bioavailabilitas.....	31
4.1.4 Hasil Prediksi Toksisitas.....	32
4.1.5 Hasil <i>Docking</i> Senyawa Bunga Telang .....	34
4.2 Pembahasan.....	35
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	
5.1 Kesimpulan .....	41
5.2 Saran .....	41
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>42</b>
<b>LAMPIRAN .....</b>	<b>47</b>

## DAFTAR GAMBAR

	<b>Halaman</b>
<b>Gambar 2. 1</b> Bunga Telang ( <i>Clitoria Ternatea L.</i> ) .....	6
<b>Gambar 2. 2</b> Kulit kepala normal .....	9
<b>Gambar 2. 3</b> Kulit kepala yang berketombe.....	9
<b>Gambar 2. 4</b> Peta Konsep .....	17
<b>Gambar 3. 1</b> Prediksi Bioavailabilitas.....	19
<b>Gambar 3. 2</b> Prediksi Toksisitas .....	20
<b>Gambar 3. 3</b> Prediksi Aktivitas .....	21
<b>Gambar 3. 4</b> Reseptor <i>Candida albicans</i> (PDB ID 4HOE).....	26
<b>Gambar 3. 5</b> Struktur <i>Ketokonazole</i> .....	26



## DAFTAR TABEL

	<b>Halaman</b>
<b>Tabel 2. 1</b> Hasil Skrining Senyawa Bunga Telang dari <i>Journal of Functional Food</i> .....	8
<b>Tabel 3. 1</b> Parameter Uji Bioavailabilitas.....	23
<b>Tabel 3. 2</b> Parameter Uji Toksisitas.....	23
<b>Tabel 3. 3</b> Parameter Uji Aktivitas Senyawa.....	24
<b>Tabel 4. 1</b> Hasil preparasi ligan menjadi struktur 2D dan 3D .....	29
<b>Tabel 4. 2</b> Hasil kode <i>SMILES</i> senyawa dengan web <i>PubChem</i> .....	31
<b>Tabel 4. 3</b> Hasil prediksi bioavailabilitas senyawa bunga telang .....	32
<b>Tabel 4. 4</b> Hasil prediksi toksisitas senyawa bunga telang .....	33
<b>Tabel 4. 5</b> Hasil nilai energi ikatan ( $\Delta G$ ) setelah <i>docking</i> .....	34



## DAFTAR LAMPIRAN

	<b>Halaman</b>
<b>Lampiran 1. Hasil <i>Docking</i></b> .....	<b>47</b>

