

SKRIPSI SARJANA FARMASI

**EKSPLORASI DAN OPTIMASI SENYAWA KANDUNGAN
AKAR KUNING (*Fibraurea tinctoria* Lour.) SEBAGAI
ANTIOKSIDAN DAN PENYEMBUHAN LUKA SECARA *IN*
*SILICO***



OLEH:

Muhammad Iqbal
NIM : 2111013023

Dosen Pembimbing:

- 1. apt. Yori Yuliandra, S.Farm., M.Farm., PhD.**
- 2. apt. Fithriani Armin, S.Si. M.Si**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG**

2025

ABSTRAK

EKSPLORASI DAN OPTIMASI SENYAWA KANDUNGAN AKAR KUNING (*Fibraurea tinctoria* Lour.) SEBAGAI ANTIOKSIDAN DAN PENYEMBUHAN LUKA SECARA IN SILICO

Oleh:

Muhammad Iqbal

NIM : 2111013023

(Program Studi Sarjana Farmasi)

Fibraurea tinctoria dikenal memiliki berbagai aktivitas farmakologis, termasuk anti-inflamasi, antibakteri, dan antiproliferatif. Penelitian sebelumnya telah berhasil mengisolasi senyawa alkaloid isokuinolin dan furanoditerpenoid dari tumbuhan ini, salah satunya adalah berberin. Senyawa ini memiliki potensi antioksidan dan antidiabetik. *Reactive Oxygen Species* (ROS) memiliki peran penting dalam penyembuhan luka, mempengaruhi proses-proses seperti hemostasis, inflamasi, angiogenesis, dan pembentukan *Extracellular Matrix* (ECM). Kadar ROS yang tinggi dapat merusak ECM. Kerusakan ECM dapat menghambat proses penting dalam penyembuhan luka, seperti angiogenesis dan re-epitelisasi. Studi ini menggunakan pendekatan *in silico*, yaitu *molecular docking* pada protein 2AZ5, 6B8Y, 6Y8M, dan 4K7O untuk mengeksplorasi senyawa dari *F. tinctoria* sebagai agen potensial antioksidan dan penyembuhan luka. Thalifolin muncul sebagai senyawa kandidat, yang secara konsisten muncul dalam 10 besar *docking score* terendah untuk protein 2AZ5, 6B8Y, 6Y8M, dan 4K7O, dengan skor -6,419, -5,378, -6,520, dan -5,492 kcal/mol. *Lead optimization* menggunakan *pharmacophore base design* dan *Multiple Parameter Optimization* (MPO) menghasilkan penurunan *docking score* untuk senyawa yang telah dioptimasi, yaitu MAR1, MAR2, MAR3, dan MAR4, dengan *docking score* dari MAR2 menurun secara signifikan yaitu -10,351 kcal/mol. Prediksi ADMET menunjukkan bahwa MAR1, MAR3, dan MAR4 menunjukkan hasil yang baik, menjadikannya kandidat potensial untuk terapi penyembuhan luka dan antioksidan. Namun, MAR2 memerlukan optimasi lebih lanjut untuk meningkatkan profil ADME-nya. Sebagai lanjutan dari penelitian ini, disarankan MAR1, MAR3, dan MAR4 untuk dianalisis lebih lanjut, sintesis dan evaluasi tambahan melalui uji *in vitro* dan *in vivo* sebagai validasi efektivitas terapeutiknya.

Kata Kunci: *Fibraurea tinctoria*, thalifolin, *molecular docking*, *lead optimization*, *Multiple Parameter Optimization*

ABSTRACT
**EXPLORATION AND OPTIMIZATION OF COMPOUNDS FROM THE
YELLOW ROOT OF (*Fibraurea tinctoria* Lour.) AS ANTIOXIDANTS AND
WOUND-HEALING AGENTS IN SILICO**

By:

Muhammad Iqbal

Student ID: 2111013023

(Bachelor of Pharmacy)

Fibraurea tinctoria is known for its diverse pharmacological activities, including anti-inflammatory, antimicrobial, and antiproliferative effects. Previous research successfully isolated alkaloid isoquinoline and furanoditerpenoid compounds from this plant, one of which is berberine. This compound is a notable antioxidant and antidiabetic potential. Reactive Oxygen Species (ROS) and oxidative stress play critical roles in wound healing by influencing processes such as hemostasis, inflammation, angiogenesis, and the formation of the Extracellular Matrix (ECM). Excessive ROS levels can damage the ECM, disrupts essential processes in wound healing, including angiogenesis and re-epithelialization. This study employs an in silico approach, specifically molecular docking, to investigate compounds from *F. tinctoria* as potential antioxidant and wound-healing agents by targeting proteins 2AZ5, 6B8Y, 6Y8M, and 4K7O. Thalifolin emerged as a lead compound, consistently ranking in the top 10 lowest docking scores for these proteins, with scores of -6,419, -5,378, -6,520, and -5,492 kcal/mol, respectively. Lead optimization using a pharmacophore-based design and Multi-Parameter Optimization (MPO) further improved the docking scores for optimized compounds, namely MAR1, MAR2, MAR3, and MAR4, with a significant decrease in the docking score of MAR2 to -10,351 kcal/mol. ADMET predictions revealed that MAR1, MAR3, and MAR4 demonstrated favorable results, identifying them as promising candidates for antioxidant and wound-healing therapies. However, MAR2 requires further optimization to improve its ADME profile. Future recommendations include the synthesis and further evaluation of MAR1, MAR3, and MAR4 through *in vitro* and *in vivo* studies to validate their therapeutic efficacy.

Keywords: *Fibraurea tinctoria*, thalifolin, molecular docking, lead optimization, Multiple Parameter Optimization