

SKRIPSI SARJANA FARMASI

**PROFIL KIMIA DAN EVALUASI INHIBITOR α -Glukosidase DARI LIMA
SPESIES *Stereocaulon*: ANALISIS LC-MS/MS DAN PENDEKATAN *IN
SILICO***



OLEH:

VEKI FANIA AYU MELANI

NIM. 2211012004

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2026**

SKRIPSI SARJANA FARMASI
PROFIL KIMIA DAN EVALUASI INHIBITOR α -Glukosidase DARI LIMA
SPESES *Stereocaulon*: ANALISIS LC-MS/MS DAN PENDEKATAN *IN*
SILICO

Oleh:



Pembimbing:

Dr. apt. Friardi Ismed
apt. Purnawan Pontana Putra, S.Si, M.Si

FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2026

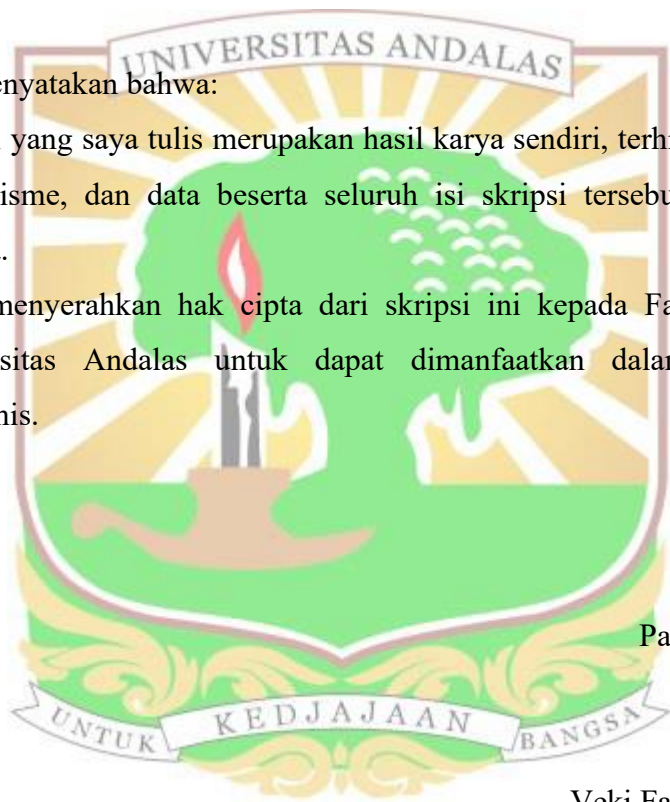
PERNYATAAN ORISINALITAS DAN PENYERAHAN HAK CIPTA

Saya yang bertandatangan di bawah ini:

Nama : Veki Fania Ayu Melani
NIM : 2211012004
Judul Penelitian : Profil Kimia dan Evaluasi Inhibitor α -Glukosidase
dari Lima Spesies *Stereocaulon*: Analisis LC-MS/MS
dan Pendekatan *in Silico*

Dengan ini menyatakan bahwa:

1. Skripsi yang saya tulis merupakan hasil karya sendiri, terhindar dari unsur plagiarisme, dan data beserta seluruh isi skripsi tersebut adalah benar adanya.
2. Saya menyerahkan hak cipta dari skripsi ini kepada Fakultas Farmasi Universitas Andalas untuk dapat dimanfaatkan dalam kepentingan akademis.



Padang, Mei 2026

Veki Fania Ayu Melani

LEMBAR PENGESAHAN PEMBIMBING

Skripsi ini diajukan sebagai salah satu syarat untuk menempuh Seminar
Hasil Penelitian Program Sarjana (S1) Farmasi pada Fakultas Farmasi
Universitas Andalas

Nama : Veki Fania Ayu Melani
NIM : 2211012004
Judul Penelitian : Profil Kimia dan Evaluasi Inhibitor α -Glukosidase
dari Lima Spesies *Stereocaulon*: Analisis LC-
MS/MS dan Pendekatan *in Silico*

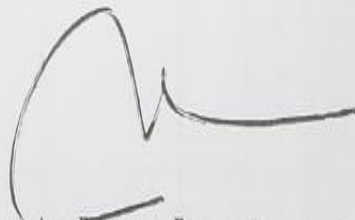
Pembimbing 1,



Dr. apt. Friardi Ismed

NIP. 198002262015041001

Pembimbing 2,



Apt. Purnawan Pontana Putra, S.Si, M.Si

NIP. 199110082019031010

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim

Alhamdulillahirabbil'alam, puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT, Tuhan semesta alam, atas segala limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi yang berjudul “Profil Kimia dan Evaluasi Inhibitor α -Glukosidase dari Lima Spesies *Stereocaulon*: Analisis LC-MS/MS dan Pendekatan *in Silico*” yang menjadi salah satu syarat untuk menyelesaikan program Pendidikan Sarjana Farmasi di Universitas Andalas, Padang.

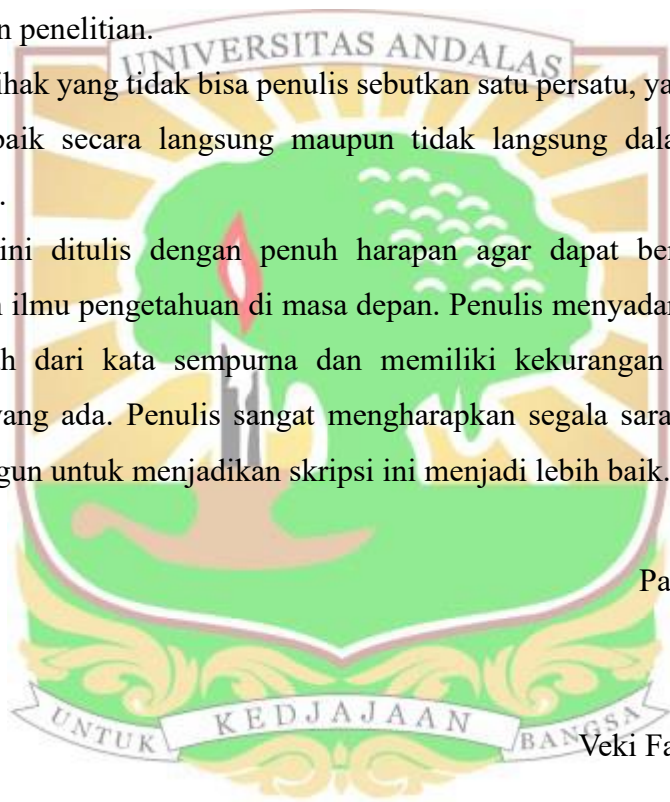
Dalam penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari orang-orang yang turut membantu, mendukung, serta mendoakan setiap perjalanan penulis. Pada kesempatan ini, penulis ingin menyampaikan penghargaan dan ucapan terima kasih kepada:

1. Bapak Dr. apt. Friardi Ismed selaku dosen pembimbing I dan Bapak apt. Purnawan Pontana Putra, S.Si, M.Si, selaku dosen pembimbing II, yang telah membimbing, mengarahkan, dan memberikan waktu, tenaga, dan pikirannya untuk membimbing penulis selama penelitian dan penyusunan skripsi ini.
2. Ibu Prof. Dr. apt. Fatma Sri Wahyuni, Ph.D selaku Dekan Fakultas Farmasi Universitas Andalas.
3. Ibu Dr. apt. Meri Susanti, M.Farm, selaku Ketua Program Studi Sarjana Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Andalas.
4. Bapak apt. Dedy Almasdy, M.Si, Ph.D (*Clin Pharm*)., selaku dosen penasihat akademik yang telah memberikan bantuan dan masukan untuk kelancaran studi penulis.
5. Bapak dan Ibu dosen Fakultas Farmasi Universitas Andalas, analis Laboratorium, dan seluruh civitas akademik yang telah mendidik, memberikan ilmu yang bermanfaat, serta membantu penulis selama mengikuti perkuliahan di Fakultas Farmasi Universitas Andalas.
6. Kedua Orang tua, kakak, dan adik yang amat penulis cintai, yang menjadi sumber semangat dan motivasi bagi penulis dalam menyelesaikan pendidikan penulis.

7. Kak apt. Nurwahidatul Arifa, M. Farm yang telah memberikan ilmu dan membantu penulis dalam menyelesaikan penelitian ini.
8. Sobat Literasi 5 cm (Ausza, Haya, Rara, Silvi) dan Tomorrow x Together (Taehyun, Daniel, Steve, Ben, Kai) yang selalu menemani penulis dalam menghadapi suka duka dunia perkuliahan.
9. Saudara BP 04 (Indah, Ausza, Edu), Merlin, Kenanga, Callista, Sulthan, dan rekan-rekan Progrezzio yang telah memberikan dukungan dan mewarnai hari-hari penulis selama perkuliahan
10. Rekan-rekan LBS yang telah memberikan dukungan kepada penulis selama melakukan penelitian.
11. Seluruh pihak yang tidak bisa penulis sebutkan satu persatu, yang memberikan bantuan baik secara langsung maupun tidak langsung dalam penyusunan skripsi ini.

Skripsi ini ditulis dengan penuh harapan agar dapat bermanfaat untuk perkembangan ilmu pengetahuan di masa depan. Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kata sempurna dan memiliki kekurangan dengan segala keterbatasan yang ada. Penulis sangat mengharapkan segala saran dan masukan yang membangun untuk menjadikan skripsi ini menjadi lebih baik.

Padang, Mei 2026



Veki Fania Ayu Melani

ABSTRAK

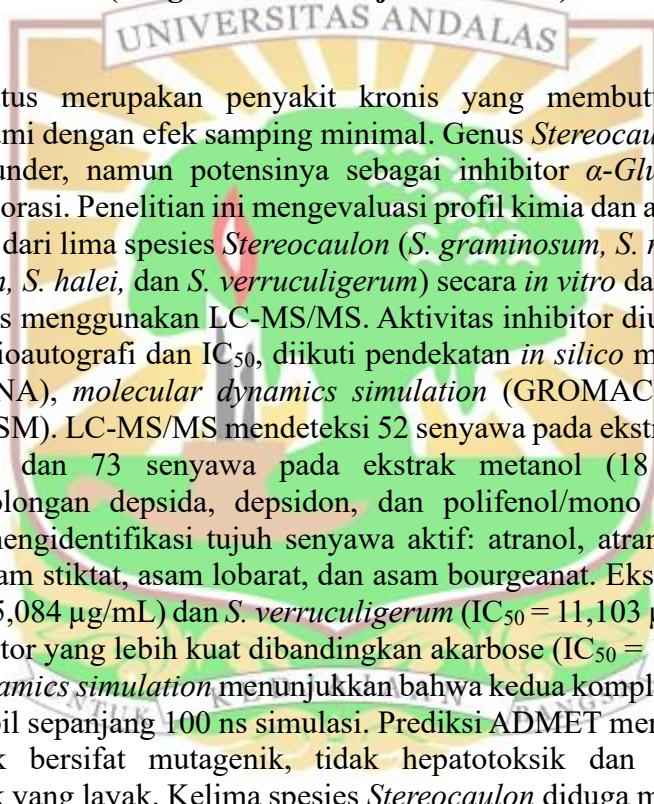
PROFIL KIMIA DAN EVALUASI INHIBITOR α -Glukosidase DARI LIMA SPESIES *Stereocaulon*: ANALISIS LC-MS/MS DAN PENDEKATAN *IN* *SILICO*

OLEH:

VEKI FANIA AYU MELANI

NIM: 2211012004

(Program Studi Sarjana Farmasi)



Diabetes melitus merupakan penyakit kronis yang membutuhkan alternatif pengobatan alami dengan efek samping minimal. Genus *Stereocaulon* dikenal kaya metabolit sekunder, namun potensinya sebagai inhibitor α -Glukosidase belum banyak dieksplorasi. Penelitian ini mengevaluasi profil kimia dan aktivitas inhibitor α -Glukosidase dari lima spesies *Stereocaulon* (*S. graminosum*, *S. massartianum*, *S. montagneanum*, *S. halei*, dan *S. verruculigerum*) secara *in vitro* dan *in silico*. Profil kimia dianalisis menggunakan LC-MS/MS. Aktivitas inhibitor diuji menggunakan metode KLT-bioautografi dan IC_{50} , diikuti pendekatan *in silico* melalui *molecular docking* (GNINA), *molecular dynamics simulation* (GROMACS), dan prediksi ADMET (pkCSM). LC-MS/MS mendeteksi 52 senyawa pada ekstrak etil asetat (29 teridentifikasi) dan 73 senyawa pada ekstrak metanol (18 teridentifikasi), didominasi golongan depsida, depsidon, dan polifenol/mono aromatik. KLT-bioautografi mengidentifikasi tujuh senyawa aktif: atranol, atranorin, MOC, etil hematamat, asam stiktat, asam lobarat, dan asam bourgeanat. Ekstrak etil asetat *S. halei* ($IC_{50} = 15,084 \mu\text{g/mL}$) dan *S. verruculigerum* ($IC_{50} = 11,103 \mu\text{g/mL}$) memiliki aktivitas inhibitor yang lebih kuat dibandingkan akardose ($IC_{50} = 101,333 \mu\text{g/mL}$). *Molecular dynamics simulation* menunjukkan bahwa kedua kompleks protein-ligan cenderung stabil sepanjang 100 ns simulasi. Prediksi ADMET menunjukkan kedua senyawa tidak bersifat mutagenik, tidak hepatotoksik dan memiliki profil farmakokinetik yang layak. Kelima spesies *Stereocaulon* diduga memiliki aktivitas inhibitor α -Glukosidase, dengan *S. halei* dan *S. verruculigerum* menunjukkan potensi yang lebih besar. Ketujuh senyawa yang teridentifikasi diduga berpotensi memiliki aktivitas inhibitor berdasarkan hasil KLT-bioautografi dan pendekatan *in silico*.

Kata Kunci: *Stereocaulon*, α -Glukosidase, LC-MS/MS, *in silico*.

ABSTRACT

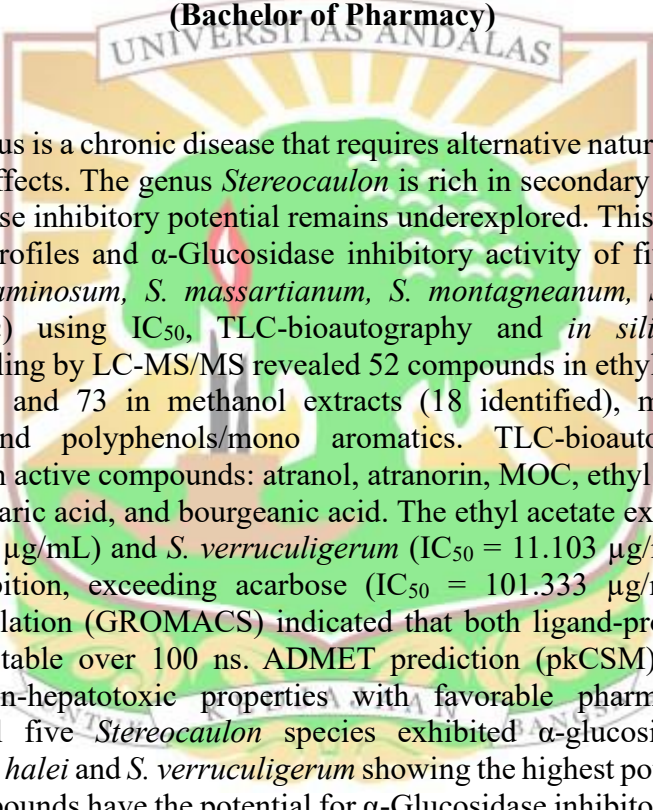
CHEMICAL PROFILING AND EVALUATION OF α -GLUCOSIDASE INHIBITOR FROM FIVE SPECIES OF *Stereocaulon*: LC-MS/MS ANALYSIS AND IN SILICO APPROACH

By:

VEKI FANIA AYU MELANI

Student ID Number: 2211012004

(Bachelor of Pharmacy)



Diabetes mellitus is a chronic disease that requires alternative natural therapies with minimal side effects. The genus *Stereocaulon* is rich in secondary metabolites, yet its α -Glucosidase inhibitory potential remains underexplored. This study evaluated the chemical profiles and α -Glucosidase inhibitory activity of five *Stereocaulon* species (*S. graminosum*, *S. massartianum*, *S. montagneanum*, *S. halei*, and *S. verruculigerum*) using IC_{50} , TLC-bioautography and *in silico* approaches. Chemical profiling by LC-MS/MS revealed 52 compounds in ethyl acetate extracts (29 identified) and 73 in methanol extracts (18 identified), mainly depsides, depsidones, and polyphenols/mono aromatics. TLC-bioautography assays identified seven active compounds: atranol, atranorin, MOC, ethyl haematommate, stictic acid, lobaric acid, and bourgeanic acid. The ethyl acetate extracts of *S. halei* ($IC_{50} = 15.084 \mu\text{g/mL}$) and *S. verruculigerum* ($IC_{50} = 11.103 \mu\text{g/mL}$) showed the strongest inhibition, exceeding acarbose ($IC_{50} = 101.333 \mu\text{g/mL}$). Molecular dynamics simulation (GROMACS) indicated that both ligand-protein complexes tended to be stable over 100 ns. ADMET prediction (pkCSM) indicated non-mutagenic, non-hepatotoxic properties with favorable pharmacokinetics. In conclusion, all five *Stereocaulon* species exhibited α -glucosidase inhibitory activity, with *S. halei* and *S. verruculigerum* showing the highest potency. The seven identified compounds have the potential for α -Glucosidase inhibitory activity based on TLC-bioautography and *in silico* approaches.

Keywords: *Stereocaulon*, α -Glucosidase, LC-MS/MS, *in silico*