

## **BAB 5**

### **SIMPULAN**

#### **5.1. Kesimpulan**

Berdasarkan data penelitian yang telah diinterpretasikan, dapat ditarik kesimpulan :

1. Urutan senyawa turunan asam sinamat yang mempunyai *rerank score* terendah yaitu asam 4-fenilsinamat, etil-*p*-butoksisinamat, isopropil-*p*-butoksisinamat, asam 4-butoksisinamat, propil-*p*-butoksisinamat, metil-*p*-butoksisinamat, asam 4-*n*-butilsinamat, asam 4-*t*-butilsinamat.
2. Asam amino yang terlibat pada interaksi turunan asam sinamat yaitu dengan reseptor 3NQ1 melalui ikatan hidrogen adalah Asn205, Glu195, Gly196, His42, His208, His204, His231, His60, Met215, Gly216.
3. Docking dengan program MVD belum dapat memprediksi hambatan senyawa-senyawa turunan asam sinamat terhadap *mushroom tyrosinase* (3NQ1).

#### **5.2. Saran**

Untuk hasil prediksi yang dilakukan dengan program Molegro menunjukkan pola interaksi yang berbeda dengan hasil eksperimen, untuk itu diperlukan studi lebih lanjut dengan menggunakan program *docking* yang lain untuk mengkonfirmasi penemuan yang sudah diperoleh pada penelitian.

## DAFTAR PUSTAKA

- Avanti, C., Soeratri, W., Soewandi, A., 2002, **Daya Hambat Epigalokatekin Galat (EGCG) dan Kombinasi Epigalokatekin Galat-Kojic Acid terhadap Aktivitas Tirosinase**, Berkala Ilmu Penyakit Kulit dan Kelamin, Volume 14 No. 3, Surabaya, 230-235.
- Alle C. F. M., 2005, **Molegro Drug Discovery**, [Online], <http://www.molegro.com/about.php>, Diakses tanggal 14 Juli 2012.
- Alle C. F. M., 2005, **Molegro Drug Discovery**, [Online], <http://cambridgesoft-chemdraw-ultra.software.informer.com/11.0/.2009>, Diakses tanggal 16 Juli 2012.
- Berman, H. M., 2008, **The Protein Data Bank: a historical perspective**, 1<sup>st</sup> ed, Acta Crystallographica Section A:Foundations of Crystallography A64, 88–95.
- Boyer RF, 2003, **Modern Experimental Biochemistry**, 3<sup>th</sup> ed, California Benjamin/Cumming Publishing.
- Chang., 2009. **An Updated Review of Tyrosinase Inhibitors**, [Online], [https://www.google.co.id/An+Updated+Review+of+Tyrosinase+Inhibitors&oq=An+Updated+Review+of+Tyrosinase+Inhibitors&gs\\_l=hp](https://www.google.co.id/An+Updated+Review+of+Tyrosinase+Inhibitors&oq=An+Updated+Review+of+Tyrosinase+Inhibitors&gs_l=hp), Diakses tanggal 25 Agustus 2012.
- Duke JA, 2004, **Dr.Duke's Phytochemical and Ethobotanical Databases**, <http://www.ars-grin.gov/duke>, Diakses pada tanggal 15 Juli 2012.
- Fitrie, A. A., 2012, **Histologi dari Melanosit**, <http://www.findtovou.co.id/document/>, diakses pada tanggal 25 Juli 2012.
- Gunadi, I., 2007. **Penentuan Daya dan Tipe Hambatan Senyawa Asam 4-t-butilsinamat terhadap Enzim Tirosinase dengan Asam Sinamat sebagai Pembanding**. Skripsi Sarjana Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.
- Harry, R. G., 1982, **Harry's Cosmeticology: The Principles and Practice of Modern Cosmetic**, 7<sup>th</sup> ed, Leonard Hill Book, New York, 1-19.

Hartanti L., Rudyanto M., 2008, **Sintesis beberapa Turunan Asam Sinamat: Pengaruh Gugus yang Terikat pada Cincin Aromatik Terhadap Kereaktifan Benzaldehida**, Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

Hartanti, L., Setiawan, H.K., 2008, **Daya Hambat Beberapa Turunan Asam Sinamat Sintetik Terhadap Enzim Tirosinase**, 1st ed, Indo. J. Chem, vol.9, 158-168.

Hartanti, L., Setiawan, H. K., Kresnamurti, A., 2011, **Molecular Docking of Several Compounds of Bungur (*Langerstroemia speciosa* (L.) Pers) Leaves to (IGF-1R) Receptor Tyrosine Kinase with Molegro Virtual Docker**, Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

Hartanti L., Setiawan H.K., Kusumadjaja A.P., 2007, **Daya Hambat beberapa Turunan Asam Sinamat Sintetik terhadap Enzim Tirosinase sebagai Bahan Aktif Pencerah Kulit**, Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

Harwood, L. M., Moody, C. J., 1989, **Experimental Organis Chemistry Principles and Practice**, Oxford University Press, London, 557-788.

Holtje, H. D., Sippl, W., Rognan, D., and Folkers, G., 2008, **Molecular Modeling: Basic Principle and Applications**, ed.3<sup>rd</sup>, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, Germany, 5-6, 9-14.

Kubo I, Kinst-Hori I, Yokohama Y., 1994. **Tyrosinase Inhibitor from Anacardium Occidentale Fruits**, J. Nat. Prod. 57.

Kumar CM, Sathisha UV, Dharmesh S, Rao AG, Singh SA, 2011, **Interaction of sesamol (3,4-methylenedioxophenol) with tyrosinase and its effect on melanin synthesis**, 3<sup>th</sup> ed, Biochimie 93, 562-529.

Lenhinger, 1990, **Principles of Biochemistry**, Edisi Kelima, bcs.whfreeman.com/lehninger5e/, Diakses pada tanggal 22 Juli 2012.

Matoba, Y., 2009, **Kojic acid-amino acid conjugated as tyrosinase inhibitors**, Biorganic and medical chemistry Letters vol.19, 5586-5589.

Natella F, Nardini M, Difelice M, Scaccini C, 1999, **Benzoic and Cinnamic Acid Derivates as Antioxidants: Structure-Activity Relation**, J. Agric. Food. Chem, 47, 1453-1549.

Pranoto, Y. O., 2007, **Penentuan Daya dan Tipe Hambatan Senyawa Asam 4-fenilsinamat terhadap Enzim Tirosinase dengan Asam Sinamat sebagai Pembanding**, Skripsi Sarjana Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

Price, N. C. & Stevens, L., 1986, **Fundamentals of Enzymology**. Oxford University Press, New York, 1-14.

Purnomo A. W., 2004, **Sintesis Isopropil-P-Butoksisinamat dan Uji Aktivitasnya sebagai Inhibitor Enzim Tirosinase**, Skripsi Sarjana Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

Qiu, l., Hua Chen, Q.,Xing Zhuang, J., 2009, **Inhibitory effects a-cyano-4-hydroxycinnamic acid on the activity of mushroom tyrosinase**, Food chemistry vol.112, 609-613.

Reynolds, J. E. F & Prasad, A. B., 1982, **Martindale: The Extra Pharmacopeia XXVIII**.

Sakuma K, Ogawa M, Sugibayashi K, Yamamoto K. 1999, **Relationship between Tyrosinase Inhibitory Action and Oxidation - Reduction Potential of Cosmetic Whitening Ingredient and Phenol Derivates**, Acc. Pharm. Res. 22, 335-339.

Salisbury FB, Ross CW, 1995, **Fisiologi Tumbuhan**, Jilid 2, Penerjemah: Lukman DR, Sumaryono, Bandung: Penerbit ITB, 145-147.

Sanchez L., 2008, **Review of CambridgeSoft ChemDraw Ultra 11.0**, [Online], <http://cambridgesoft-chemdrawultra.software.informer.com/11.0/>. Diakses tanggal 24 Juli 2012.

Siswandono, 2011, Airlangga journal of Pharmacy, Studi Pemodelan Molekul Interaksi Beberapa Turunan Penisilin dengan Reseptor DD-Transpeptidase dari Streptomyces R61(1PWC), vol.9 no.2, Fakultas Farmasi Universitas Airlangga, 33-41.

Sung, D.N, Joonho.P, 2011, 3D-QSAR Analysis and Molecular Docking of Thiosemicarbazone Analogues as a Potent Tyrosinase Inhibitor, vol.32 no.4, Chungnam National University, 1241-1247.

Tan, C.,Zhu, W .,Lu.Y ., 2002, **Aloin, Cinnamic acid and Saphocardine are Potent Inhibitors of Tyrosinase**, Chin Med J, 115, 1859-1862.

Wang, S. F., O. Sangho, Y. S. Xiu, Z. J. Wang, H. Y. Han, J. Lee, and G. Y. Qian, 2012, **Computational Prediction of Protein Protein Interactions of Human Tyrosinase**, *Research Article*, pp. 1-7

Wirahadikusumah M, 2001, **Biokimia: Protein, Enzim, dan Asam Nukleat**, Cetakan kelima. Penerbit ITB, Bandung, 50-74.

Yesilada A,Zorlu E, Aksu F, Yesilada E. 1996, **3,4-Dimethoxycinnamic Acid Tertiary Amides: Synthesis and Evaluation of Antiinflammatory and Analgesic Activities**, Farmaco, 595-559.

Zhang, X., X. Hu, A.Hou, dan H. Wang, 2009, **Inhibitory Effect of 2,4,2\_,4\_-Tetrahydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-chalcone on Tyrosinase Activity and Melanin Biosynthesis**, *Bio. Pharm Bull.*, vol, 32(1),pp. 86-90.