STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA BIOAKTIF DAUN BAWANG DAYAK (*Eleutherine americana*) TERHADAP AKTIVITAS ANTIBAKTERI *Propionibacterium acnes*

SKRIPSI



Oleh:

NISRINA ATHIRA

NIM. I1021221094

PROGRAM STUDI FARMASI

FAKULTAS KEDOKTERAN

UNIVERSITAS TANJUNGPURA

PONTIANAK

2026

STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA BIOAKTIF DAUN BAWANG DAYAK (*Eleutherine americana*) TERHADAP AKTIVITAS ANTIBAKTERI *Propionibacterium acnes*

SKRIPSI

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Memperoleh gelar Sarjana Farmasi (S.Farm) pada Program Studi Farmasi Fakultas Kedokteran Universitas Tanjungpura Pontianak

Oleh:

NISRINA ATHIRA

NIM. I1021221094

PROGRAM STUDI FARMASI

FAKULTAS KEDOKTERAN

UNIVERSITAS TANJUNGPURA

PONTIANAK

2026

SKRIPSI

STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA BIOAKTIF DAUN BAWANG DAYAK (*Eleutherine americana*) TERHADAP AKTIVITAS ANTIBAKTERI *Propionibacterium acnes*

OLEH:

NISRINA ATHIRA

NIM. I1021221094

Telah dipertahankan dihadapan Panitia Penguji Skripsi
Program Studi Farmasi Fakultas Kedokteran
Universitas Tanjungpura
Tanggal : 2 April 2026

Disetujui,

Pembimbing Utama,	Pembimbing Pendamping,
Dr. Hj. Sri Wahdaningsih,M.sc.,Apt	apt.Robby Najini,M.Farm., AIFO-P
NIP. 198111012008012011	NIP. 198111012008012011

Penguji Utama	Penguji Pendamping
Dr. Inarah Fajriaty, M.Si., Apt	Dr. Bambang Wijianto, M.Sc.,Apt
NIP. 198004072009122002	NIP. 198412312009121005

Mengetahui,
Dekan Fakultas Kedokteran
Universitas Tanjungpura

Dr. Ita Armyanti, M.pd.,Ked
NIP.198110042008012011

Lulus tanggal : 2 April 2026
No. SK Dekan FK : 2934/DST/UN22.9/DT.00.10/2026
Tanggal SK : 8 Juni 2026

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama: Nisrina Athira

NIM: I021221094

Jurusan/Prodi: Farmasi

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Apabila dikemudian hari terbukti atau dapat dibuktikan skripsi ini hasil jiplakan, saya bersedia menerima sangsi atas perbuatan tersebut.

Pontianak, 5 Maret 2026

Yang Membuat Pernyataan,

Nisrina Athira

NIM. I021221094

HALAMAN PERSEMBAHAN

"*Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai dengan kesanggupannya*."

(QS. Al-Baqarah: 286)

Pertama-tama saya panjatkan rasa syukur ke hadirat Allah *subhanahu wata'ala* atas segala nikmat dan rahmat-Nya, berupa kesehatan dan kekuatan, yang melimpah selama proses penyusunan skripsi ini. Shalawat serta salam senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad *shallalahu 'alaihi wasallam*. Skripsi ini saya dedikasikan sebagai wujud usaha, semangat, serta ungkapan cinta dan kasih sayang saya kepada orang-orang yang sangat berarti dalam hidup saya. Karya sederhana ini, saya persembahkan untuk :

1. Ayah penulis, sosok pekerja keras dan terkuat yang pernah penulis kenal semasa hidup, Bapak Suhendri. Beliau selalu mengajarkan bagaimana cara bertahan di kerasnya kehidupan, Beliau yang mengajarkan penulis untuk selalu meraih mimpi sejauh dan sebesar apapun itu.
2. Ibu penulis, Wanita yang penuh kasih sayang dan gigih, sosok yang akan mengusahakan apapun untuk penulis, Ibu Rizka Novianti. Beliau adalah sosok yang ambis dan pekerja keras namun tetap dibalut kelembutan, Beliau yang selalu mengajarkan penulis untuk memberi jeda sedikit pada hidup lalu melanjutkan hidup lagi dengan semangat yang baru.
3. Adik Penulis, Aiman Al-Fakhri dan Nafisa Syarafana Akredita, yang selalu mendukung, dan selalu menjadi alasan penulis untuk terus menjadi contoh yang baik sebagai kakak.

4. Keluarga besar Penulis, Almarhumah nenek Rusnah dan kakek Malik yang selalu mendukung penulis, kakek dani dan nenek ati' yang selalu memberi semangat dari jauh,para paman dan bibi yang juga selalu mendukung dan memberi semangat.
5. Sahabat penulis, Dwi Saputri dan Muna Nurrabiha Azmi yang selalu mendengarkan keluh kesah, serta suka duka penulis.
6. Gadis-gadis lucu, *My ride or die* dari grup 'Manusia Antifragile' yaitu Salma, Shalum, Nana, Dinda, Andini, Tia, Alya, Memel, dan Yohana. Yang Menjadi warna paling indah di sepanjang perjalanan penulis di Farmasi.
7. Rekan seperjuangan, Amanda Agustin yang selalu membersamai dalam hal apapun.
8. Teman seperantauan dari grup 'Ayam geprek' yaitu Ina, Winalda, Shindy, Rani dan Manda. Yang selalu saling memberikan semangat.
9. Teman-teman Kelas A1 dan angkatan 2022 Serdefa yang berjalan bersama sejak awal memasuki dunia perkuliahan di Farmasi.
10. Motivator Penulis, grup musik yang telah menjadi sumber semangat, inspirasi, dan penghiburan selama proses penyusunan skripsi, yaitu SEVENTEEN. yang melalui karya dan dedikasinya telah memberikan motivasi untuk terus berusaha dan tidak menyerah.
11. Terakhir, untuk Nisrina Athira yaitu sosok penulis karya sederhana ini. Terima kasih untuk tetap berusaha melanjutkan perjalanan yang berat ini, Sejauh ini *you did really well*,thirr.

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT Tuhan Yang Maha Esa karena berkat dan karunia-Nya, penulis bisa menyelesaikan skripsi ini dengan judul "STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA BIOAKTIF DAUN BAWANG DAYAK (*Eleutherine americana*) TERHADAP AKTIVITAS ANTIBAKTERI *Propionibacterium acnes*" dengan baik.

Penulisan skripsi ini dilakukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan Program Sarjana (S1) prodi Farmasi pada Universitas Tanjungpura. Pada kesempatan ini, penulis akan menyampaikan rasa terima kasih kepada pihak-pihak yang telah membantu dalam proses penyelesaian skripsi ini:

1. Ibu dr. Ita Armyanti, M.Pd.Ked. selaku Dekan Fakultas Kedokteran Universitas Tanjungpura.
2. Bapak Dr. Bambang Wijianto, M.Sc., Apt. selaku Ketua Bagian Farmasi Fakultas Kedokteran Universitas Tanjungpura Pontianak.
3. Ibu Nera Umilia Purwanti. M. Sc, Apt. selaku Koordinator Program Studi Farmasi Fakultas Kedokteran Universitas Tanjungpura Pontianak.
4. Ibu Dr. Hj. Sri Wahdaningsih, M.Sc., Apt selaku Pembimbing Utama yang telah bersedia meluangkan waktu untuk membimbing, mengarahkan, mengajarkan, dan memberikan semangat selama penulisan proposal skripsi ini.
5. Bapak apt. Robby Najini, M.Farm., AIFO-P selaku Pembimbing Pendamping yang telah bersedia meluangkan waktu untuk mengingatkan, membimbing, mengarahkan, mengajarkan, dan memberikan dorongan selama penulisan

proposal skripsi ini.

6. Ibu Dr. Inarah Fajriaty, M.Si., Apt selaku penguji utama, atas masukan dan saran yang sangat berarti untuk penyempurnaan skripsi ini.
7. Bapak Dr. Bambang Wijianto, M.Sc., Apt. selaku Penguji pendamping Sekaligus dosen pembimbing akademik yang telah memberikan arahan dan masukan selama masa perkuliahan serta dalam proses penyusunan skripsi ini.
8. Para dosen dan civitas akademik di Fakultas Kedokteran Universitas Tanjungpura Pontianak, yang telah memberikan ilmu serta masukan dan saran.

Pontianak, 5 Maret 2026



Penulis

DAFTAR ISI

Halaman

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN iii

HALAMAN PERSEMBAHAN iv

DAFTAR ISI viii

DAFTAR TABEL xii

DAFTAR GAMBAR xiii

DAFTAR SINGKATAN xiv

DAFTAR LAMPIRAN xv

ABSTRAK xvi

ABSTRACT xvii

BAB 1 PENDAHULUAN 1

I.1 Latar Belakang 1

I.3 Tujuan Penelitian 3

I.4 Manfaat Penelitian 4

BAB II TINJAUAN PUSTAKA 5

II.1 Bawang Dayak (*Eleutherine americana*) 5

II.1.1 Klasifikasi 5

II.1.2 Morfologi 6

II.1.3 Kandungan 7

II.2 Jerawat (*Acne vulgaris*) 9

II.2.1 Definisi Jerawat (*Acne vulgaris*) 9

II.2.2 Penyebab Jerawat (*Acne vulgaris*) 10

II.2.3 Patogenesis Jerawat (*Acne vulgaris)* 10
II.3 Bakteri *Propionibacterium acnes* 11
II.3.1 Definisi *Propionibacterium acnes* 11
II.3.2 Klasifikasi *Propionibacterium acnes* 12
II.3.2 Morfologi *P.acnes* 12
II.3.4 Enzim dan faktor virulensi 13
II.4 Antibakteri 15
II.4.1 Mekanisme 16
II.5 *Molecular Docking* 17
II.5.1 Definisi dan Prinsip Dasar 17
II.5.2 Reseptor 17
II.5.3 Parameter Penilaian 18
II.6 Lipinski's Rule of Five 19
II.7 Landasan Teori 20
II.8 Kerangka Konsep Penelitian 23
BAB III METODOLOGI 24
III. 1 Rancangan Penelitian 24
III.2 Alat dan Bahan 24
III.2.1 Alat 24
III.2.2 Bahan 24
III.4 Variabel Penelitian 25
III.5 Definisi Operasional 26

III.7 *Molecular Docking* 26
III.7.1 Persiapan Protein 26
III.7.2 Persiapan Ligan 27
III.7.3 Validasi Metode *Molecular Docking* 27
III.7.4 Proses *Docking* Senyawa Aktif 27
III.7.5 Analisis Interaksi Senyawa dengan Reseptor 28
III.7.6 Pemeringkatan Senyawa dan Penilaian 28
III.7.7 Dokumentasi Hasil 28
III.9 Alur Penelitian 30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 31
IV.1 Evaluasi *Drug-likeness* 39
IV.4 Penyiapan Protein Target (Reseptor) 49
IV.3 Penyiapan Struktur Ligan 39
IV.4 *Docking* 49
IV. 4.1 Reseptor Sialidase 50
IV.4.2 Reseptor PBP 59
IV.4.3 Reseptor PAI 70
BAB V PENUTUP 81
V.1 Kesimpulan 81
V.2 Saran 82
DAFTAR PUSTAKA 83
LAMPIRAN 89

DAFTAR TABEL

Halaman

Tabel 2.1 Senyawa aktif daun bawang dayak 7

Tabel 2.2 Parameter Penilaian *Molecular Docking* 19

Tabel 3.1 *Webtools* dan Perangkat Lunak.....24

Tabel 3.2 Definisi Operasional 26

Tabel 4.1 Hasil Karakterisasi Aturan *Lipinski rule of five*.....32

Tabel 4.2 Konformasi Struktur 2D dan 3D Ligan dengan *ChemDraw*.....42

Tabel 4.3 Parameter Uji dan Hasil Validasi Protein Target.....44

Tabel 4.5 Hasil *Docking* Protein Target PBP 60

Tabel 4.6 Hasil *Docking* Protein Target PAI 70

DAFTAR GAMBAR

Halaman

Gambar 2.1 Tanaman Bawang dayak 5

Gambar 2.3 Kerangka Konsep Penelitian 23

Gambar 3.1 Alur Penelitian.....30

Gambar 4.1 Protein target yang sudah di Preparasi 33

Gambar 4.2 Visualisasi 2D dan 3D Validasi Metode 45

Gambar 4.3 Konfirmasi 2D dan 3D *Docking* Protein Target Sialidase 50

Gambar 4.4 Visualisasi 3D dan 2D *Docking* Protein Target Sialidase.....56

Gambar 4.5 Konfirmasi 2D dan 3D *Docking* Protein Target PBP 60

Gambar 4.6 Visualisasi 3D dan 2D *Docking* Protein Target PBP 67

Gambar 4.8 Konfirmasi 2D dan 3D *Docking* Protein Target PAI 71

Gambar 4.9 Visualisasi 3D dan 2D *Docking* Protein Target PBP 77

DAFTAR SINGKATAN

AV	:	*Acne vulgaris*
AMR	:	*Antimicrobial Resistance*
DAVID	:	*Database for Annotation, Visualization and Integrated Discovery*
GBD	:	*Global Burden of Disease*
LGA	:	*Lamarckian Genetic Algorithm*
MD	:	*Molecular Dynamics*
PDB	:	*Protein Data Bank*
P. acnes	:	*Propionibacterium acnes*
RMSD	:	*Root Mean Square Deviation*
TLR	:	*Toll-Like Receptor*
WHO	:	*World Health Organization*
PBP	:	*Penicilin Binding Protein*
PAI	:	*Polysaturated Fatty Acid Isomerase*

DAFTAR LAMPIRAN

Halaman

Lampiran 1. Surat Payung Penelitian.....90

Lampiran 2. Struktur Senyawa.....91

Lampiran 2. Struktur Reseptor.....93

ABSTRAK

Jerawat (*acne vulgaris*) merupakan penyakit kulit inflamasi yang salah satu penyebab utamanya adalah bakteri *Propionibacterium acnes*. Penggunaan antibiotik dalam terapi jerawat berpotensi menimbulkan resistensi, sehingga diperlukan alternatif antibakteri dari bahan alam. Daun bawang dayak (*Eleutherine americana*) diketahui mengandung berbagai senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai agen antibakteri. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi interaksi senyawa bioaktif daun bawang dayak terhadap protein target *P. acnes* menggunakan pendekatan *molecular docking*. Senyawa yang dianalisis meliputi *Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin Gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherine* terhadap reseptor sialidase (PDB: 7LBV), *penicillin-binding protein* (PBP) (PDB: 3UPO), dan *polyunsaturated fatty acid isomerase* (PAI) (PDB: 2B9X). Validasi metode *docking* menunjukkan nilai RMSD sebesar 0,719 Å pada reseptor sialidase, 1,724 Å pada reseptor PBP, dan 1,826 Å pada reseptor PAI, yang mengindikasikan bahwa metode yang digunakan memiliki akurasi yang baik. Hasil simulasi menunjukkan bahwa beberapa senyawa memiliki afinitas pengikatan yang lebih stabil dibandingkan kontrol positif klindamisin. Pada reseptor sialidase, *Rutin* menunjukkan energi ikatan paling stabil sebesar −10,78 kcal/mol. Pada reseptor PBP, *Myricetin* menunjukkan afinitas pengikatan paling stabil sebesar −7,87 kcal/mol, sedangkan pada reseptor PAI, *Epicatechin gallate* menunjukkan afinitas pengikatan paling stabil sebesar −11,74 kcal/mol.Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa bioaktif daun bawang dayak berpotensi sebagai kandidat inhibitor terhadap protein target *P. acnes* serta berpeluang untuk dikembangkan sebagai agen antibakteri alami dalam terapi jerawat.

Kata kunci: Bawang Dayak (*Eleutherine americana*), *Propionibacterium acnes, Molecular Docking,* Antibakteri

ABSTRACT

Acne vulgaris is an inflammatory skin disease, with one of its primary causes being the bacterium Propionibacterium acnes*. The use of antibiotics in acne therapy may lead to bacterial resistance, thereby necessitating alternative antibacterial agents derived from natural products. Dayak onion (*Eleutherine americana*) is known to contain various bioactive compounds with potential antibacterial activity. This study aimed to analyze the interaction potential of bioactive compounds from Dayak onion against target proteins of* P. acnes *using a molecular docking approach. The compounds analyzed included Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin Gallate, Elecanacin, and Eleutherine against sialidase (PDB: 7LBV), penicillin-binding protein (PBP) (PDB: 3UPO), and polyunsaturated fatty acid isomerase (PAI) (PDB: 2B9X). Docking validation showed RMSD values of 0.719 Å for sialidase, 1.724 Å for PBP, and 1.826 Å for PAI, indicating that the docking method has good accuracy. The simulation results demonstrated that several compounds exhibited more stable binding affinities compared to the positive control, clindamycin. For the sialidase receptor, rutin showed the most stable binding energy at −10.78 kcal/mol. For PBP, myricetin exhibited the most stable binding affinity at −7.87 kcal/mol, while for PAI, epicatechin gallate showed the most stable binding energy at −11.74 kcal/mol.These findings suggest that the bioactive compounds of Dayak onion have potential as inhibitors of* P. acnes *target proteins and may be further developed as natural antibacterial agents for acne therapy.*

Keywords: *Dayak onion (Eleutherine americana), Propionibacterium acnes, Molecular Docking, Antibacterial*

BAB 1

PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Jerawat (*Acne vulgaris*) merupakan penyakit kulit inflamasi pada unit pilosebasea akibat penyumbatan keratin dan kolonisasi bakteri *Propionibacterium acnes*. Kondisi ini umum terjadi pada remaja dan dewasa muda.[1] Berdasarkan data *Global Burden of Disease* (GBD) 2021, prevalensi *acne global* meningkat dari 8.563,4 menjadi 9.790,5 per 100.000 penduduk, dengan tingkat keparahan tertinggi pada usia 15–19 tahun.[2] Salah satu faktor utama penyebab jerawat adalah *P. acnes*, bakteri anaerob Gram-positif yang berperan dalam memicu inflamasi melalui berbagai faktor virulensi dan enzim yang mendukung kolonisasi serta kelangsungan hidup bakteri di kulit.[3,4]

Terapi jerawat umumnya menggunakan antibiotik seperti klindamisin, eritromisin, dan tetrasiklin. Namun, penggunaan jangka panjang antibiotik tersebut berisiko menimbulkan resistensi bakteri serta gangguan keseimbangan mikrobiota kulit..[5] Hal ini mendorong pencarian alternatif terapi yang tidak hanya bersifat antibakteri, tetapi juga mampu menghambat aktivitas protein target yang berperan dalam virulensi dan kelangsungan hidup bakteri

Daun bawang dayak (*Eleutherine americana*) dilaporkan mengandung senyawa flavonoid dan turunan naftokuinon yang berpotensi sebagai agen antibakteri terhadap bakteri Gram-positif maupun Gram-negatif.[5,6] Senyawa turunan Flavonoid dan Naftakuinon yang terkandung dalam daun bawang dayak

seperti *Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin Gallate, Elecanacin, dan Eleutherin* diketahui memiliki aktivitas dalam mengganggu integritas membran sel serta menghambat aktivitas enzim bakteri. Secara molekuler, senyawa-senyawa tersebut berpotensi berinteraksi dengan sisi aktif protein target seperti sialidase, PBP, dan *polyunsaturated fatty acid isomerase*, sehingga dapat menghambat fungsi enzimatik yang berperan dalam patogenesis *P. acnes*. [7]

Metode *in silico* seperti *molecular docking* digunakan untuk memprediksi interaksi antara senyawa bioaktif dan target protein melalui analisis nilai afinitas ikatan, jenis interaksi, serta residu asam amino yang terlibat. Pendekatan ini memungkinkan identifikasi awal potensi senyawa sebagai inhibitor terhadap protein target spesifik secara lebih efisien. Selain itu, *molecular docking* memiliki kelebihan dalam hal kecepatan, biaya yang relatif rendah, serta kemampuan untuk mengevaluasi banyak senyawa secara simultan tanpa memerlukan uji laboratorium secara langsung. Metode ini juga mampu memberikan gambaran mekanisme pengikatan pada tingkat molekuler, termasuk prediksi lokasi interaksi pada sisi aktif protein, sehingga dapat digunakan sebagai dasar dalam pengembangan dan optimasi kandidat obat.

Oleh karena itu, analisis *molecular docking* terhadap senyawa bioaktif daun bawang dayak terhadap protein sialidase, *penicillin-binding protein*, dan *polyunsaturated fatty acid isomerase P. acnes* diharapkan dapat memberikan gambaran mekanisme penghambatan secara molekuler serta mendukung

pengembangan kandidat fitofarmaka alami untuk terapi jerawat yang lebih efektif dan aman.[8]

I.2 Perumusan Masalah

Penelitian yang dilakukan memiliki rumusan masalah sebagai berikut :

1. Bagaimana nilai afinitas ikatan dari senyawa aktif daun bawang dayak (*Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherin*) dengan reseptor *P. acnes.*
2. Bagaimana residu asam amino yang berinteraksi dari senyawa aktif daun bawang dayak (*Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherin*) dengan reseptor *P. acnes.*
3. Bagaimana jenis ikatan dari senyawa aktif daun bawang dayak (*Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherin*) dengan reseptor *P. acnes.*

I.3 Tujuan Penelitian

Penelitian yang dilakukan memiliki tujuan sebagai berikut :

1. Menganalisis nilai afinitas ikatan yang terbentuk antara senyawa aktif daun bawang dayak *(Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherin*) dengan reseptor *P. acnes*
2. Menganalisis residu asam amino yang berinteraksi antara senyawa aktif daun bawang dayak *(Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherin*) dengan reseptor *P. acnes*

3. Mengetahui jenis ikatan yang terbentuk antara senyawa aktif daun bawang dayak *(Isoliquiritigenin, Rutin, Quercetin, Kaempferol, Myricetin, Epicatechin gallate, Elecanacin,* dan *Eleutherin*) dengan reseptor *P. acnes*

I.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini meningkatkan pemahaman mengenai interaksi senyawa bioaktif daun Bawang Dayak dengan protein target *P.acnes* serta berkontribusi pada pengembangan ilmu farmasi dengan pendekatan *molecular docking*. Selain itu, penelitian ini menjadi sumber informasi bagi masyarakat dan industri untuk memanfaatkan tanaman herbal lokal sebagai kandidat terapi jerawat berbasis bahan alami yang aman dan efektif.