

**STUDI *IN SILICO*: MINYAK ATSIRI KETUMBAR (*Coriandrum sativum* L.)
SEBAGAI QS-INHIBITOR DALAM PEMBENTUKAN BIOFILM
*Staphylococcus aureus***

***IN SILICO STUDY: CORIANDER ESSENTIAL OIL (*Coriandrum sativum* L.) AS
QS-INHIBITOR AGAINST *Staphylococcus aureus* BIOFILM***

SKRIPSI SARJANA SAINS

Oleh

HENDRAWAN BAKRI



**FAKULTAS BIOLOGI
UNIVERSITAS NASIONAL
JAKARTA
2022**

**STUDI *IN SILICO*: MINYAK ATSIRI KETUMBAR (*Coriandrum sativum* L.)
SEBAGAI QS-INHIBITOR DALAM PEMBENTUKAN BIOFILM *Staphylococcus*
*aureus***

**Skripsi ini diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
SARJANA SAINS DALAM BIDANG BIOLOGI**

Oleh

HENDRAWAN BAKRI

183112620170129



**FAKULTAS BIOLOGI
UNIVERSITAS NASIONAL
JAKARTA
2022**

FAKULTAS BIOLOGI UNIVERSITAS NASIONAL

Skripsi, Jakarta Januari 2023

Hendrawan Bakri

STUDI IN SILICO: MINYAK ATSIRI KETUMBAR (*Coriandrum sativum* L.) SEBAGAI QS-INHIBITOR DALAM PEMBENTUKAN BIOFILM *Staphylococcus aureus*

viii + 35 halaman, 6 tabel, 8 gambar

Staphylococcus aureus adalah bakteri Gram positif yang sering dijumpai pada kasus-kasus infeksi nosokomial. Dalam bentuk biofilmnya, *S. aureus* dapat melekat pada instrumen medis yang nantinya berpotensi untuk menginfeksi pasien. Proses pembentukan dan regulasi biofilm diatur oleh *quorum sensing* (QS), sebagai bentuk respon terhadap faktor lingkungan. Ketumbar secara *in-vitro* dilaporkan memiliki berbagai aktivitas farmakologis seperti antibakteri, antibiofilm, antioksidan, hingga antiinflamasi. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi minyak atsiri ketumbar sebagai QS-inhibitor dalam pembentukan biofilm *S. aureus*, serta prediksi profil farmakokinetik dan toksisitasnya. Berdasarkan hasil penambatan molekuler, didapatkan sejumlah 25 senyawa aktif terpilih yang memiliki nilai energi bebas ikatan (ΔG) yang lebih rendah dari ligan alami protein 4BXI dan 4G4K, dengan *Cis-Dihydrocarvone* merupakan senyawa aktif dengan nilai energi bebas ikatan terendah pada protein 4BXI, dan *Carvacrol* pada protein 4G4K. Hasil visualisasi jenis interaksi residu asam amino menunjukkan bahwa *Cis-Dihydrocarvone* memiliki interaksi hidrogen pada residu MET A:326 protein 4BXI, sedangkan *Carvacrol* tidak terlihat memiliki interaksi hidrogen pada protein 4G4K. Hasil prediksi profil farmakokinetik dan toksisitas senyawa aktif terpilih menunjukkan bahwa 25 senyawa aktif terpilih memiliki tingkat penyerapan yang baik melalui usus, tetapi kurang baik melalui kulit. Sejumlah tiga senyawa aktif terpilih merupakan inhibitor sitokrom P450 isoform CYP1A2. Sejumlah dua senyawa aktif terpilih berpotensi menyebabkan hepatotoksitas, dan satu senyawa aktif terpilih memiliki nilai LD₅₀ kelas I. Berdasarkan hasil yang didapatkan, dapat disimpulkan bahwa sejumlah 25 dari total 33 senyawa aktif minyak atsiri ketumbar berpotensi dijadikan sebagai QS-inhibitor terhadap *S. aureus*, dengan dua senyawa aktif terbaik yaitu *Cis-Dihydrocarvone* dan *Carvacrol*.

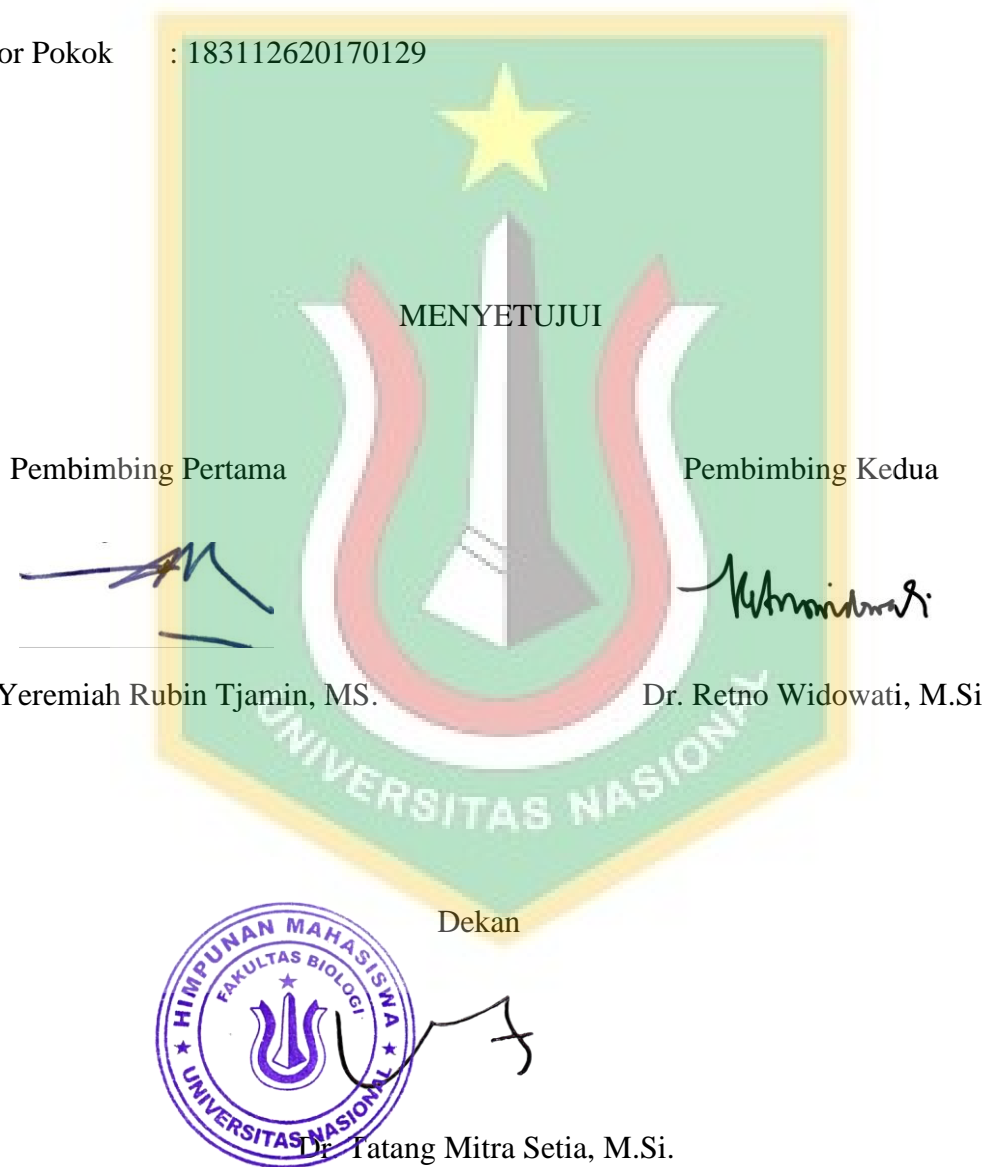
Kata kunci : biofilm, energi bebas, penambatan

Daftar bacaan : 53 (1990 – 2021)

Judul Skripsi : STUDI *IN SILICO*: MINYAK ATSIRI KETUMBAR (*Coriandrum sativum* L.) SEBAGAI QS-INHIBITOR DALAM PEMBENTUKAN BIOFILM *Staphylococcus aureus*

Nama Mahasiswa : Hendrawan Bakri

Nomor Pokok : 183112620170129



Tanggal lulus: 10 Januari 2023

KATA PENGANTAR

Puji serta syukur penulis panjatkan ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat dan karunia-Nya, serta Ibu dan Bapak Orang Tua penulis atas dukungan berupa doa dan kasih sayang-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan Skripsi dengan judul **“STUDI *IN SILICO*: MINYAK ATSIRI KETUMBAR (*Coriandrum sativum* L.) SEBAGAI QS-INHIBITOR DALAM PEMBENTUKAN BIOFILM *Staphylococcus aureus*”** ini, sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dalam Bidang Biologi.

Selama penulis menyusun Skripsi ini, penulis tidak lepas dari bimbingan, dukungan, serta saran dan masukan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Bapak Drs. Yeremia Rubin Tjamin, MS. selaku Pembimbing Pertama yang telah meluangkan waktunya untuk senantiasa memberikan masukan serta ilmu pengetahuannya.
2. Ibu Dr. Retno Widowati, M.Si. selaku Pembimbing Kedua yang telah meluangkan waktunya dalam membimbing penulis dengan kritik dan sarannya.
3. Bapak Drs. Ikhsan Matondang, M.Si. selaku Pembimbing Akademik angkatan 2018 yang selalu senantiasa memberikan semangat kepada penulis.
4. Bapak Dr. Tatang Mitra Setia, M.Si. selaku Dekan Fakultas Biologi Universitas Nasional.
5. Teman-teman Fabiona angkatan 2018, khususnya Stefan, Afifah, Daniel, dan Anisa yang telah memberikan dukungan rohani kepada penulis selama penyusunan Skripsi.

Penulis menyadari bahwa masih cukup banyak hal yang perlu disempurnakan dari Skripsi ini. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran agar Skripsi ini dapat menjadi acuan dan ilmu pengetahuan bagi berbagai pihak

Jakarta, 23 Januari 2022

Penulis

DAFTAR ISI

Halaman

KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR.....	viii
BAB I PENDAHULUAN	1
BAB II METODE PENELITIAN	5
A. Waktu dan Tempat Penelitian	5
B. Instrumen Penelitian.....	5
C. Cara Kerja.....	6
D. Analisis Data	9
BAB III HASIL DAN PEMBAHASAN.....	11
A. Hasil Penelitian.....	11
1. Validasi Protokol Penambatan	11
2. Penambatan Molekuler.....	12
3. Visualisasi Hasil Penambatan.....	13
4. Prediksi Profil Farmakikinetik dan Toksisitas	14
B. Pembahasan	16
BAB IV KESIMPULAN DAN SARAN.....	21
A. Kesimpulan.....	21
B. Saran	21
DAFTAR PUSTAKA.....	22
LAMPIRAN I. TABEL LAMPIRAN	28
LAMPIRAN II. GAMBAR LAMPIRAN	35

DAFTAR TABEL

Halaman

Naskah

Tabel 1. Definisi operasional variabel (DOV)	5
Tabel 2. Posisi dan ukuran dimensi parameter grid box	11

Lampiran

Tabel Lampiran 1. Senyawa aktif minyak atsiri ketumbar.....	28
Tabel Lampiran 2. Nilai energi bebas ikatan ligan alami dan ligan uji terhadap protein 4BXI dan 4G4K	29
Tabel Lampiran 3. Jenis interaksi residu asam amino	30
Tabel Lampiran 4. Hasil prediksi profil farmakokinetik dan toksisitas senyawa aktif terpilih	34



DAFTAR GAMBAR

Halaman

Naskah

Gambar 1. Struktur kristalografi protein 4BXI (a) dan 4G4K (b).....	7
Gambar 2. Parameter grid box reseptor (4BXI) (kiri) dan AgrA (4G4K) (kanan)	8
Gambar 3. Perbandingan konformasi antara ligan alami hasil penambatan kembali (hijau) dengan ligan alami kristalografi (merah).....	12
Gambar 4. Persentase energi bebas ikatan senyawa aktif terpilih pada protein 4BXI dan 4G4K.....	13
Gambar 5. A. Interaksi antara Cis-Dihydrocarvone dengan protein 4BXI. B. Interaksi antara Carvacrol dengan protein 4G4K.....	14
Gambar 6. Sistem quorum sensing Agr pada Staphylococcus	16

Lampiran

Gambar Lampiran 1. Hasil perhitungan nilai RMSD ligan alami protein 4BXI pada proses validasi protokol penambatan	35
Gambar Lampiran 2. Hasil perhitungan nilai RMSD ligan alami protein 4G4K pada proses validasi proses protokol penambatan.....	35