



**SKRINING VIRTUAL DAN *MOLECULAR DOCKING*  
POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER  
DAUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava* L)  
TERHADAP *Clostridium perfringens***

Skripsi  
Diajukan guna memenuhi  
sebagian syarat untuk memperoleh derajat Sarjana Kedokteran  
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan  
Universitas Lambung Mangkurat

Oleh  
Siti Rabiatul Adabiah  
2010911320047

**PROGRAM STUDI KEDOKTERAN PROGRAM SARJANA  
FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
BANJARMASIN**

**Desember 2023**

**PENGESAHAN SKRIPSI**

**SKRINING VIRTUAL DAN MOLECULAR DOCKING  
POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER  
DAUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava* L)  
TERHADAP *Clostridium perfringens***

**Siti Rabiatul Adabiah, NIM: 2010911320047**

Telah dipertahankan di hadapan **Dewan Penguji Skripsi**  
Program Studi Kedokteran Program Sarjana  
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan  
Universitas Lambung Mangkurat  
Pada Hari Rabu, Tanggal 27 Desember 2023

**Pembimbing I**

Nama: dr. Nila Nirmalasari, M.Sc, M.H, Sp.F  
NIP : 198306232010012009

**Pembimbing II**

Nama: Dr. Dra. Fujiati, M.Si  
NIP : 196401041994032001

**Penguji I**

Nama: Dr. dr. Iwan Aflanie, M.Kes, Sp.F, SH  
NIP : 197309141998021001

**Penguji II**

Nama: Dr. dr. Oski Illiandri, M. Kes  
NIP : 197702212006041001

Banjarmasin, 10 Januari 2023

Mengetahui,  
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana

Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes.  
NIP. 19710912 199702 2 001

## **PERNYATAAN**

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam usulan 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.

Banjarmasin, 18 Desember 2023



Siti Rabiatul Adabiah

## ABSTRAK

### SKRINING VIRTUAL DAN *MOLECULAR DOCKING* POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER D AUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava L*) TERHADAP *Clostridium perfringens*

Siti Rabiatul Adabiah

*Clostridium perfringens* merupakan salah satu penyebab penyakit bawaan makanan yang paling umum. Virulensi bakteri ini sebagian besar disebabkan oleh ~ 20 racun kuat. *C. perfringens* menyebabkan berbagai macam penyakit. Sehingga perlu dilakukan penghambatan protein bakteri tersebut. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui apa saja senyawa metabolit sekunder yang terdapat pada daun jambu biji (*Psidium guajava L*) yang berpotensi sebagai antibakteri dan mencari senyawa paling kuat intraksi ikatannya terhadap *C. perfringens*. Metode penelitian ini dilakukan secara komputasi berupa virtual skринing dan *molecular docking*. Software yang digunakan adalah AutoDock tools, Autodock Vina, BIOVIA Discovery Studio, dan PyMol dengan website PubChem Open Chemistry Database, STITCH *database*. Penelitian diawali dengan skринing senyawa metabolit dan menentukan protein targetnya melalui STITCH *database*. Proses docking dilakukan senyawa aktif hasil skринing dan penisilin G sebagai kontrol. Hasil penelitian menunjukkan skринing virtual senyawa metabolit sekunder berupa senyawa quercetin memiliki interaksi ikatan paling tinggi terhadap protein *Clostridium perfringens* yaitu CPF\_1991, dari hasil dockingnya didapatkan *binding affinity* quercetin sebesar -7.8 Kcal/mol dengan RMSD 0.000 Å dan memiliki ikatan hidrogen yang berfungsi menstabilkan ikatan. Berdasarkan penelitian yang dilakukan dapat disimpulkan bahwa senyawa metabolit sekunder pada daun jambu biji yang paling berpotensi yaitu quercetin sehingga dapat menjadi senyawa kandidat untuk menghambat *Clostridium perfringens*.

**Kata-kata kunci:** Daun jambu biji, *Clostridium perfringens*, *Skrining virtual*, *Molecular docking*

## **ABSTRACT**

### **VIRTUAL SCREENING AND MOELCULAR DOCKING POTENTIAL OF SECONDARY METABOLYTE COMPOUNDS IN GUAVA LEAVES (*Psidium guajava* L) AGAINST *Clostridium perfringens***

**Siti Rabiatul Adabiah**

*Clostridium perfringens* is one of the most common causes of foodborne illness. The virulence of this bacterium is largely due to its ~20 potent toxins. *C. perfringens* causes a variety of diseases. So it is necessary to inhibit the bacterial protein. The aim of this research is to find out what secondary metabolite compounds found in guava leaves (*Psidium guajava* L) have the potential to act as antibacterials and to find the compounds with the strongest affinity for *C. perfringens*. This research method was carried out computationally in the form of virtual screening and molecular docking. The software used is AutoDock tools, Autodock Vina, BIOVIA Discovery Studio, and PyMol with the PubChem Open Chemistry Database website, STITCH database. The research began with screening metabolite compounds and determining the target protein using the STITCH database. The docking process was carried out by active compounds from the screening results and penicillin G as a control. The results of the research showed that the virtual screening of secondary metabolite compounds in the form of quercetin compounds had the highest binding interactions with the *C. perfringens* protein, namely CPF\_1991, from the docking results it was found that the binding affinity for quercetin was -7.8 Kcal/mol with RMSD 0.000 Å and has hydrogen bonds which function to stabilize the bond. The conclusion was that the guajava leaf quercetin compound has high potential so it can be a candidate compound to inhibit *Clostridium perfringens*.

**Key words:** *Psidium guajava* L, *Clostridium perfringens*, Virtual screening, Molecular docking

## KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan Skripsi yang berjudul “**SKRINING VIRTUAL DAN MOLECULAR DOCKING POTENSI SENYAWA METABOLIK SEKUNDER DAUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava* L) TERHADAP *Clostridium perfringens***“, tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat sarjana kedokteran di Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan, Dr. dr. Istiana, M. Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordiantor Program Studi Kedokteran Program Sarjana, Prof. Dr. dr. Triawanti, M. Kes. yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
3. Kedua dosen pembimbing, dr. Nila Nirmalasari, M.Sc, M.H, Sp.F dan Dr. Dra. Fujiati, M.Si yang berkenan memberikan saran dan arahan dalam penyelesaian skripsi ini.
4. Kedua dosen penguji, Dr. dr. Iwan Aflanie, M.Kes, Sp.F, SH dan Dr. dr. Oski Illiandri, M. Kes yang memberi kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi semakin baik.

5. Bapak Didik Huswo Utomo, Ph.D yang telah memberikan bimbingan terkait *molekular docking*
6. Kedua orang tua Kaharudin dan Khusnul Fatimah, adik Rofi Akmal Assalam serta keluarga penulis yang selalu memberikan doa dan dukungan kepada penulis dalam pelaksanaan pendidikan sarjana kedokteran dan penyusunan skripsi.
7. Rekan penelitian, Devina Yulie Fatria, Rohma Toyibah, Dea Inthay Wulan, dan Rizka Maulida yang telah menjadi teman suka dan duka dalam penyusunan skripsi ini
8. Samiah, Andini Sarah Rahmayani, Andini Bena Maulidya, Evana Latifah, Dea Inthay Wulan, Hadijah, Nurul Izzah, Sukma Dina Zakia, dan Tsalsa Rohmatul Jannah Mujiningtyas, yang selalu memberikan semangat dan dukungan dalam penyelesaian skripsi ini, serta semua pihak atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, akan tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan.

Banjarmasin, Desember 2023

Penulis

## DAFTAR ISI

	<b>Halaman</b>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	i
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	ii
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	iii
<b>ABSTRAK</b> .....	iv
<b>ABSTRACT</b> .....	v
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	vi
<b>DAFTAR ISI</b> .....	viii
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	xi
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xii
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	xiv
<b>DAFTAR SINGKATAN</b> .....	xv
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	1
A. Latar Belakang Masalah .....	1
B. Rumusan Masalah.....	3
C. Tujuan Penelitian .....	4
D. Manfaat Penelitian .....	4
E. Keaslian Penelitian .....	5
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	7
A. Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava L</i> ) .....	7
B. Senyawa Metabolit Sekunder .....	13



C. <i>Clostridium perfringens</i> .....	14
D. Skrining virtual .....	19
E. <i>Molekular Docking</i> .....	21
<b>BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS</b> .....	26
A. Landasan Teori .....	26
B. Hipotesis .....	29
<b>BAB IV METODE PENELITIAN</b> .....	30
A. Rancangan Penelitian.....	30
B. Bahan dan Alat penelitian.....	30
C. Variabel Penelitian.....	32
D. Definisi Operasional .....	32
E. Prosedur Penelitian .....	33
F. Teknik Pengumpulan dan Pengolahan Data .....	35
G. Cara Analisis Data .....	36
H. Waktu dan Tempat Penelitian.....	36
<b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN</b> .....	37
A. Skrining Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L) .....	37
B. Analisis Hasil <i>Molekular Docking</i> .....	42
C. Analisis Toksisitas Quercetin pada Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajva</i> L) .....	50
<b>BAB VI PENUTUP</b> .....	52
A. Simpulan .....	52

B. Saran .....	52
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>53</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>60</b>

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>		<b>Halaman</b>
1.1	Keaslian Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	5
2.1	Toksintipe <i>Clostridium perfringens</i> Hubungannya dengan Penyakit .....	15
5.1	Daftar Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L).....	37
5.3	Combined Score Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> .....	40
5.5	Hasil Docking Quercetin Dengan Protein CPF_1991 .....	43
5.6	Hasil Docking Penisilin G Dengan Protein CPF_1991.....	44
5.7	Jenis Interaksi & Residu Asam Amino Quercetin dengan CPF_1991.....	46
5.8	Jenis Interaksi & Residu Asam Amino Quercetin dengan CPF_1991.....	47
5.9	Hasil Prediksi Toksisitas Quercetin Pada Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L).....	50

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar</b>	<b>Halaman</b>
2.1 Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L).....	8
2.2 Struktur dasar Flavonoid.....	10
2.3 <i>Clostridium perfringens</i> .....	19
2.4 Prosedur Dan Alat Yang Dapat Digunakan Sebelum, Selama, Dan Setelah Protein-Ligan <i>Molecular Docking</i> Dalam Desain Obat.....	24
3.1 Skema Kerangka Teori Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	27
3.2 Skema Kerangka Konsep Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	28
4.1 Struktur Tiga Dimensi Protein <i>Clostridium perfringens</i> CPF_1991.....	30
4.2 Skema Prosedur Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji ( <i>Psidium guajava</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	35
5.1 Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder ( quercetin dan phenol) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH database.....	38
5.2 Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (catechin dan kaempferol) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> .....	39
5.3 Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (rutin dan titerphenoid) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> .....	39

5.4	Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (eugenol) dengan Protein Clostridium perfringens.....	40
5.5	Score Prediksi Interaksi Spesifik Senyawa Quercetin terhadap Protein CPF_1991 Clostridium perfringens.....	42
5.6	Visualisasi 2D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Senyawa Quercetin dengan Protein CPF_1991.....	46
5.7	Visualisasi 3D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Senyawa Quercetin dengan Protein CPF_1991.....	47
5.8	Visualisasi 2D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Penisilin G dengan Protein CPF_1991.....	48
5.9	Visualisasi 3D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Penisilin G dengan Protein CPF_1991.....	49

## DAFTAR LAMPIRAN

<b>Lampiran</b>		<b>Halaman</b>
1	Web AlphaFold Protein Structure Database .....	61
2	Web PubChem Open Chemistry Database.....	61
3	Software AutoDock Vina V1.2.3.....	62
4	Software PyMol.....	62
5	Software BIOVIA Discovery Studio Visualizer 4.1. ....	63
6	Gambar Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji yang dapat berinteraksi dengan <i>Clostridium perfringens</i> melalui <i>STITCH database</i> .....	63
7	Gambar Keterangan <i>Score Edge Confidence</i> dan Skor Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Jambu Biji yang Dapat Berinteraksi dengan <i>Clostridium perfringens</i> melalui <i>STITCH database</i> .....	64
8	Tabel Hasil <i>Molecular Docking</i> .....	66

## DAFTAR SINGKATAN

RMSD	: <i>Root Mean Square Deviation</i>
H <sub>2</sub>	: <i>Hidrogen</i>
DNA	: <i>Deoxyribonucleic acid</i>
PLANTS	: <i>Protein-ligand ANT sistem</i>
MVD	: <i>Molegro Virtual Docking</i>
CO	: <i>Karbon monoksida</i>
CPA	: <i>Clostridium perfringens Alpha toxin</i>
Ph	: <i>Potential Hydrogen</i>
TTD	: <i>Therapeutic Target Database</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
NetB	: <i>Necrotic Enteritis Beta</i>
CPB2	: <i>toksin beta-2</i>
BEC	: <i>enterotoksin biner C.perfringens</i>
CPE	: <i>Plasmid C. perfringens enterotoksin</i>