



**SKRINING VIRTUAL DAN *MOLECULAR DOCKING*  
POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER  
DAUN BERINGIN (*Ficus benjamina* L)  
TERHADAP *Clostridium perfringens***

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

Oleh  
Devina Yulie Fatria  
2010911120011

**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 BERINGIN (*Ficus  
benjamina* L) TERHADAP *Clostridium perfringens***

**Devina Yulie Fatria, NIM: 2010911120011**

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 : 197604191996032004

**Penguji I**

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

**Penguji II**

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

Banjarmasin, 10 Januari 2024

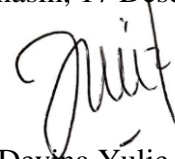
Mengetahui,  
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana

Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes.  
NIP. 197109121997022001

## **PERNYATAAN**

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam usulan penelitian 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, 17 Desember 2023



Devina Yulie Fatria

## ABSTRAK

### SKRINING VIRTUAL DAN *MOLECULAR DOCKING* POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DAUN BERINGIN (*Ficus benjamina* L) TERHADAP *Clostridium perfringens*

Devina Yulie Fatria

*Clostridium perfringens* adalah jenis bakteri gram positif berbentuk batang dan anaerobik. *Strain C. perfringens* tipe A mengakibatkan keracunan makanan dan diare. Saat ini, beberapa senyawa metabolit sekunder dinilai memiliki aktivitas antibakteri dan dibuktikan dari beberapa penelitian. Daun beringin (*Ficus benjamina* L) tanaman yang memiliki banyak kandungan metabolit sekunder dan memiliki aktivitas antibakteri. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa metabolit sekunder pada daun beringin dan mengskrinng senyawa paling berpotensi menghambat *Clostridium perfringens* secara virtual dan dilakukan *molecular docking* untuk mengetahui interaksi lainnya. Metode yang digunakan untuk mengskrinng senyawa metabolit sekunder melalui *STITCH database*. Pencarian senyawa metabolit sekunder melalui PubChem dan protein CPF\_2245 melalui AlphaFold. *Docking* dilakukan menggunakan *software* AutoDock Vina. Hasil skrining virtual senyawa metabolit sekunder didapatkan senyawa quercetin memiliki interaksi tertinggi terhadap CPF\_2245. Nilai *binding affinity* quercetin dengan CPF\_2245 -7,6 Kcal/mol dan untuk penisilin G sebagai kontrol -7,2 Kcal/mol, RMSD 0,000 Å dan memiliki ikatan hidrogen yang berperan menstabilkan ikatan. Kesimpulan didapatkan senyawa quercetin daun beringin memiliki potensi yang tinggi sehingga dapat menjadi senyawa kandidat untuk menghambat *Clostridium perfringens*.

**Kata-kata kunci:** daun beringin, *Clostridium perfringens*, skrining virtual, *molecular docking*

## **ABSTRACT**

### **VIRTUAL SCREENING AND MOLECULAR DOCKING POTENTIAL OF SECONDARY METABOLITE COMPOUNDS IN BERINGIN LEAVES (*Ficus benjamina* L) AGAINST *Clostridium perfringens***

**Devina Yulie Fatria**

*Clostridium perfringens* is type of rod-shaped and anaerobic gram-positive bacteria. *C. perfringens* type A strains cause food poisoning and diarrhea. Currently, several secondary metabolite compounds are considered to have antibacterial activity and this has been proven by several studies. Banyan leaves (*Ficus benjamina* L) are plants that contain a lot of secondary metabolites and have antibacterial activity. This research aims to determine secondary metabolite compounds in banyan leaves and screen the compounds with the most potential to virtually inhibit *Clostridium perfringens* and carry out molecular docking to determine other interactions. The method used to screen secondary metabolite compounds is through the STITCH database. Search for secondary metabolite compounds via PubChem and CPF\_2245 protein via AlphaFold. Docking is carried out using AutoDock Vina. The results of virtual screening secondary metabolite compounds showed that the quercetin compound had the highest interaction with the CPF\_2245. The binding affinity value of quercetin with CPF\_2245 is -7,6 Kcal/mol and for penicillin G as a control -7,2 Kcal/mol, RMSD 0,000 Å and has hydrogen bonds which play a role in stabilizing the bond. The conclusion was that the banyan leaf quercetin compound has high potential so it can be a candidate compound to inhibit *Clostridium perfringens*.

*Keywords: Ficus benjamina* leaves, *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 METABOLIT SEKUNDER DAUN BERINGIN (*Ficus benjamina* 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, S.H 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 *molecular docking*.
6. Kedua orang tua Muhammad Padlullah, S.E dan Tri Astuti Siswanti, A.M.Keb serta keluarga penulis yang selalu memberikan doa dan *support* selama perkuliahan dan penyusunan skripsi.
7. Rekan penelitian, Siti Rabiatal Adabiah dan Rohma Toyibah yang telah membantu dan kebersamai selama proses penelitian.
8. Teman-teman *hydra* (angkatan XXIV TBM-Cs) serta semua pihak atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.
9. Azie Aprianto yang selalu memberikan *support* dan bantuan selama perkuliahan dan penyusunan skripsi.

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

Banjarmasin, Januari 2024

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> .....	x
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xi
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	xiii
<b>DAFTAR SINGKATAN</b> .....	xiv
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	1
A. Latar Belakang Masalah .....	1
B. Rumusan Masalah .....	4
C. Tujuan Penelitian .....	4
D. Manfaat Penelitian .....	5
E. Keaslian Penelitian .....	6
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	7
A. Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) .....	7
B. Metabolit Sekunder .....	11



C. <i>Clostridium perfringens</i> .....	12
D. Skrining Virtual .....	16
E. <i>Molecular Docking</i> .....	17
<b>BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS</b> .....	22
A. Landasan Teori .....	22
B. Hipotesis .....	25
<b>BAB IV METODE PENELITIAN</b> .....	26
A. Rancangan Penelitian.....	26
B. Bahan dan Alat Penelitian.....	26
C. Variabel Penelitian.....	27
D. Definisi Operasional .....	28
E. Prosedur Penelitian .....	29
F. Teknik Pengumpulan dan Pengolahan Data .....	31
G. Cara Analisis Data .....	31
H. Waktu dan Tempat Penelitian.....	32
<b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN</b> .....	33
A. Skrining Senyawa Metabolit Sekunder.....	33
B. <i>Binding Affinity</i> .....	38
C. RMSD ( <i>Root Mean Square Deviation</i> ).....	39
D. Jenis Ikatan .....	39
E. Analisis Toksisitas Quercetin pada Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) .....	43

<b>BAB VI PENUTUP</b> .....	45
A. Simpulan .....	45
B. Saran .....	45
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	46
<b>LAMPIRAN</b> .....	54

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>		<b>Halaman</b>
1.1	Keaslian Penelitian Skrining Virtual dan <i>Molecular Docking</i> Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	6
5.1	Daftar Senyawa Metabolit Sekunder Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L).....	33
5.2	<i>Score</i> Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> .....	36
5.3	Hasil <i>Docking</i> Quercetin dan Penisilin G dengan Protein CPF_2245.....	38
5.4	Jenis Interaksi & Residu Asam Amino CPF_2245 dengan Quercetin.....	39
5.5	Jenis Interaksi & Residu Asam Amino CPF_2245 dengan Penisilin G.....	41
5.6	Hasil Prediksi Toksisitas Quercetin.....	43

## DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
2.1	Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L).....	7
2.2	<i>Clostridium perfringens</i> .....	15
2.3	Prosedur dan Alat yang Dapat Digunakan Sebelum, Selama, dan Setelah Protein-Ligan <i>Molecular Docking</i> Dalam Desain Obat.....	18
3.1	Skema Kerangka Teori Penelitian Skrining Virtual dan <i>Molecular Docking</i> Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	23
3.2	Skema Kerangka Konsep Penelitian Skrining Virtual dan <i>Molecular Docking</i> Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	24
4.1	Struktur Tiga Dimensi Protein <i>Clostridium perfringens</i> (CPF_2245).....	26
4.2	Skema Prosedur Penelitian Skrining Virtual dan <i>Molecular Docking</i> Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Daun Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> L) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> .....	31
5.1	Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (Kaempferol 3-O-Rutinoside, Kaempferol, Troxerutin, dan Beta Amyrin) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH <i>Database</i> .....	34
5.2	Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (Naringenin, <i>Cinnamic Acid</i> , dan <i>Caffeic Acid</i> ) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH <i>Database</i> .....	34
5.3	Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (Quercetin) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH	

	<i>Database</i> .....	35
5.4	Gambar Visualisasi 2D Melalui Discovery Studio Hasil <i>Docking</i> Senyawa Quercetin dengan Protein CPF_2245.....	40
5.5	Gambar Visualisasi 3D Melalui Discovery Studio dan Pymol Hasil <i>Docking</i> Senyawa Quercetin dengan Protein CPF_2245.....	41
5.6	Gambar Visualisasi 2D Melalui Discovery Studio Hasil <i>Docking</i> Penisilin G dengan Protein CPF_2245.....	42
5.7	Gambar Visualisasi 3D Melalui Discovery Studio dan Pymol Hasil <i>Docking</i> Senyawa Penisilin G dengan Protein CPF_2245.....	42

## DAFTAR LAMPIRAN

<b>Lampiran</b>		<b>Halaman</b>
1	Gambar <i>Score</i> Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder dengan <i>Clostridium perfringens</i> dari <i>STITCH Database</i> .....	55
2	Gambar Interaksi Quercetin dengan CPF_2245 dari <i>STITCH Database</i> .....	56
3	Pencarian Senyawa Metabolit Sekunder dan Protein.....	57
4	Tabel Nilai <i>Binding Affinity</i> .....	58