



**SKRINING VIRTUAL DAN *MOLECULAR DOCKING*
POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER
GAMBAS (*Luffa acutangula*) TERHADAP *Clostridium*
*perfringens***

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

Oleh
Rohma Toyibah
2010911120002

**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
GAMBAS (*Luffa acutangula*) TERHADAP *Clostridium
perfringens***

Rohma Toyibah, NIM: 2010911120002

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 : 19830632010012009

Pembimbing II

Nama: Dr. Dra. Fujjati, 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. 197109121997022001

PERNYATAAN

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.

Banjarmasin, 27 Desember 2023



Rohma Toyibah

ABSTRAK

SKRINING VIRTUAL DAN *MOLECULAR DOCKING* POTENSI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER GAMBAS (*Luffa acutangula*) TERHADAP *Clostridium perfringens*

Rohma Toyibah

Clostridium perfringens adalah bakteri spora gram positif anaerobik. *Clostridium perfringens* adalah penyebab gas gangren dan keracunan makanan termolabil enterotoksin. Tanaman banyak digunakan untuk penelitian. Gambas (*Luffa acutangula*) merupakan tanaman yang memiliki senyawa-senyawa metabolit sekunder dengan aktivitas antibakteri. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui kandungan senyawa metabolit sekunder pada gambas dan menganalisis senyawa yang berpotensi untuk berinteraksi dengan *Clostridium perfringens* secara virtual skринing dan *molecular docking*. Skринing virtual senyawa metabolit sekunder gambas melalui STITCH database memiliki hasil bahwa senyawa delphinidin memiliki interaksi paling tinggi terhadap protein *Clostridium perfringens*. AutoDock 1.5.7. adalah aplikasi yang digunakan *molecular docking* untuk mengetahui interaksi dari senyawa delphinidin yang didapat dari PubChem Open Chemistry dengan protein CPF_2326 yang didapat dari AlphaFold Protein Structure Database. Hasil *binding affinity* delphinidin dengan protein CPF_2326 adalah -8.1 Kcal/mol, RMSD memiliki deviasi yang kecil yaitu 0.000 Å dan jenis ikatan memiliki beberapa ikatan hidrogen. Penisilin G merupakan antibiotik sebagai kontrol pada delphinidin. Delphinidin merupakan senyawa metabolit sekunder gambas yang berpotensi sebagai antibakteri dan dapat dijadikan kandidat penghambat *Clostridium perfringens*.

Kata-kata kunci: *Luffa acutangula*, *Clostridium perfringens*, skринing virtual, *molecular docking*

ABSTRAK

VIRTUAL SCREENING AND POTENTIAL MOLECULAR DOCKING OF GAMBAS (*Luffa acutangula*) SECONDARY METABOLITE COMPOUNDS AGAINST *Clostridium perfringens*

Rohma Toyibah

Clostridium perfringens is an anaerobic gram-positive spore bacterium. *Clostridium perfringens* is the cause of gas gangrene and thermolabile enterotoxin food poisoning. Plants are widely for research. Gambas (*Luffa acutangula*) is a plant that has secondary metabolite compounds with antibacterial activity. The aim of this research is to determine the content of secondary metabolite compounds in gambas and analyze compounds that have the potential to interact with *Clostridium perfringens* through virtual screening and molecular docking. Virtual screening of secondary metabolite compounds of gambas via the STITCH database resulted in the compound delphinidin having the highest interaction with the *Clostridium perfringens* protein. AutoDock 1.5.7. is an application used for molecular docking to determine the interaction of the delphinidin compound obtained from PubChem Open Chemistry with the CPF_2326 protein obtained from the AlphaFold Protein Structure Database. The binding affinity result of delphinidin with the CPF_2326 protein is -8.1 Kcal/mol, the RMSD has a small deviation, 0.000 Å and the type of bond has several hydrogen bonds. Penicillin G is an antibiotic as a control for delphinidin. Delphinidin is a secondary metabolite compound of gambas which has potential as an antibacterial and can be used as a candidate inhibitor of *Clostridium perfringens*.

Kata-kata kunci: *Luffa acutangula*, *clostridium perfringens*, virtual screening, molecular docking

KATA PENGANTAR

Puji uji 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 GAMBAS (*Luffa acutangula*) 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. Fujjati, 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. Kedua orang tua, Suwari dan Erma Suryani serta keluarga penulis yang selalu memberikan doa dan dukungan kepada penulis dalam pelaksanaan pendidikan sarjana kedokteran dan penyusunan skripsi.
6. Rekan penelitian, Devina Yulie Fatria, Siti Rabiatul Adabiah, Rizka Maulida, Dea Inthay Wulan serta semua pihak atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.
7. Najwa Raisha, yang selalu memberikan semangat dan dukungan dalam penyelesaian skripsi ini.

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

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
ABSTRAK	v
KATA PENGANTAR	vii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	viii
DAFTAR SINGKATAN	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang Masalah	1
B. Rumusan Masalah	3
C. Tujuan Penelitian	3
D. Manfaat Penelitian	4
E. Keaslian Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
A. Gambas (<i>Luffa acutangula</i>)	7
B. <i>Clostridium perfringens</i>	11
C. Pembusukan Jenazah	14

<i>D. Molecular Docking</i>	16
BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS	20
A. Landasan Teori	20
B. Hipotesis	23
BAB IV METODE PENELITIAN	24
A. Rancangan Penelitian.....	24
B. Bahan dan Alat Penelitian.....	24
C. Variabel Penelitian.....	25
D. Definisi Operasional	26
E. Prosedur Penelitian	27
F. Teknik Pengumpulan dan Pengolahan Data	29
G. Cara Analisis Data	29
H. Waktu dan Tempat Penelitian.....	30
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	32
DAFTAR PUSTAKA	50

DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
1.1	Keaslian Penelitian Skrining Virtual Senyawa Metabolit Sekunder Gambas (<i>Luffa acutangula</i>) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i> Secara <i>In Silico</i>	5
5.1	Daftar Senyawa Metabolit Sekunder Gambas (<i>Luffa acutangula</i>).....	33
5.2	Score Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder gambas (<i>Luffa acutangula</i>) dengan protein <i>Clostridium perfringens</i>	38
5.3	Hasil <i>docking</i> delphinidin dengan protein CPF_2326.....	42
5.4	Jenis Interaksi & Residu Asam Amino CPF_2326 dengan Delphinidin.....	42
5.5	Hasil <i>docking</i> penisilin G dengan protein CPF_2326.....	44
5.6	Hasil <i>docking</i> penisilin G dengan protein CPF_2326.....	44
5.7	Hasil Prediksi Toksisitas Delphinidin gambas (<i>Luffa acutangula</i>).....	47

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Gambas (<i>Luffa acutangula</i>).....	7
2.2 Antosianidin utama pada tumbuhan.....	11
2.3 <i>Clostridium perfringens</i>	14
2.4 Visualisasi Molecular Docking Reseptor terhadap ligan Circumin dan Ar-Turmeron dalam bentuk 3D.....	20
3.1 Skema Kerangka Teori Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Gambas (<i>Luffa acutangula</i>) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i>	21
3.2 Skema Kerangka Konsep Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Sekunder gambas (<i>Luffa acutangula</i>) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i>	22
4.1 Struktur Tiga Dimensi protein <i>Clostridium perfringens</i> (CPF_2326).....	24
4.2 Skema Prosedur Penelitian Skrining Virtual Potensi Senyawa Metabolit Sekunder Gambas (<i>Luffa acutangula</i>) Terhadap <i>Clostridium perfringens</i>	29
5.1 Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH database.....	34
5.2 Hasil <i>Predicted Functional Partners</i> Senyawa Delphinidin dari STITCH database.....	35
5.3 Keterangan Edge Confidence.....	35
5.4 Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (Delphinidin) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH database.....	37
5.5 Keterangan <i>minimum required interaction score</i>	37

5.6	Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (Pelargonidin dan Cyanidin) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH database.....	38
5.7	Interaksi Senyawa Metabolit Sekunder (Peonidin, Malvidin dan Petunidin) dengan Protein <i>Clostridium perfringens</i> dari STITCH database.....	39
5.8	Prediksi Interaksi Spesifik Senyawa Delphinidin dengan Protein CPF_2326 <i>Clostridium perfringens</i>	42
5.9	Visualisasi 2D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Senyawa Delphinidin dengan Protein CPF_2326.....	44
5.10	Visualisasi 3D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Senyawa Delphinidin dengan Protein CPF_2326.....	45
5.11	Visualisasi 2D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Penisilin G dengan Protein CPF_2326.....	47
5.12	Visualisasi 3D Melalui Discovery Studio Hasil Docking Penisilin G dengan Protein CPF_2326.....	48

DAFTAR SINGKATAN

FK ULM	: Fakultas Kedokteran Universitas Lambung Mangkurat
PSKSP	: Program Studi Kedokteran Program Sarjana
CDC	: <i>Centers for Disease Control</i>
pH	: <i>Potential Hydrogen</i>
DNA	: <i>Deoxyribose Nucleic Acid</i>
RMSD	: <i>Root Mean Square Deviation</i>
ATP	: <i>Adenosin Trifosfat</i>
CPA	: Alpha-toxin
CPB	: Beta-toxin
ETX	: Epsilon-toxin
ITX	: Iota-toxin
CPE	: Enterotoxin
LGA	: <i>Lamarckian Genetic Algorithm</i>
TTD	: <i>Therapeutic Targets Database</i>
PDB	: Protein Data Bank