

**Studi *In Silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa  
Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) sebagai Antibakteri  
*Staphylococcus aureus***

Usulan Penelitian Skripsi  
Diajukan guna memenuhi sebagian syarat  
untuk memperoleh derajat Sarjana Kedokteran Gigi  
Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat

Diajukan oleh  
Anjelita  
2211111120014



**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI  
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI  
BANJARMASIN**

**Mei, 2026**

**Studi *In Silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa  
Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) sebagai Antibakteri  
*Staphylococcus aureus***

Usulan Penelitian Skripsi  
Diajukan guna memenuhi sebagian syarat  
untuk memperoleh derajat Sarjana Kedokteran Gigi  
Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat

Diajukan oleh  
Anjelita  
2211111120014



**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI  
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI  
BANJARMASIN**

**Mei, 2026**

## HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Anjelita ini

Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin,.....  
Pembimbing Utama

(apt. Yusrine Wasiaturrehman, S.Farm., M.Farm)

NIP. 198904302019032016

Banjarmasin,.....  
Pembimbing Pendamping

(Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed)

NIP. 199007272019032025

## HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

Skripsi oleh Anjelita

Telah dipertahankan di depan dewan penguji

Pada tanggal .....

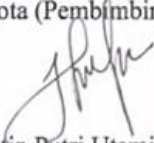
Dewan Penguji

Ketua (Pembimbing Utama)



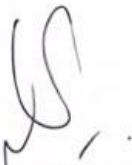
apt. Yusriat Wasiaturrahmah, S.Farm., M.Farm

Anggota (Pembimbing Pendamping)



Juliyatin-Putri Utami, S.Si., M.Biomed

Anggota



drg. AmylNindia Carabelly, M.Si

Anggota



drg. Melisa Budipramana, Sp. Ort., M.Imun

**Skripsi**

**STUDI *IN SILICO* PREDIKSI FARMAKOKINETIKA DAN  
TOKSISITAS SENYAWA DAUN KECAPI (*SANDORICUM KOETJAPE  
MERR.*) SEBAGAI ANTIBAKTERI *STAPHYLOCOCCUS AUREUS***

dipersiapkan dan disusun oleh

**Anjelita**

telah dipertahankan di depan dewan penguji pada  
tanggal 6 Mei 2026

**Susunan Dewan Penguji**

Pembimbing Utama



apt. Yusrinie Wasiaturrahmah, S.Farm., M.Farm

Pembimbing Pendamping



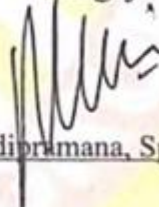
Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed

Penguji



drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si

Penguji



drg. Melisa Budi-pramana, Sp. Ort., M.Imun

Skripsi ini telah diterima sebagai salah satu persyaratan  
untuk memenuhi persyaratan Kelulusan Kedokteran Gigi



drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si  
Koordinator Program Studi Kedokteran Gigi

## **HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS**

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini merupakan hasil karya saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi. Semua sumber yang dikutip atau dirujuk dalam skripsi ini telah saya sebutkan didalam daftar pustaka.

Banjarmasin, 6 Mei 2026

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Anjelita', with a small dot at the end.

Anjelita

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS  
AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai civitas akademik Universitas Lambung Mangkurat, saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : Anjelita  
NIM : 2211111120010  
Program Studi : Kedokteran Gigi  
Fakultas : Kedokteran Gigi  
Jenis karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Lambung Mangkurat Hak Bebas Royalti Noneklusif (Non-exclusive Royalty Free Right) atas karya ilmiah saya yang berjudul:

**“Studi *In Silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) sebagai Antibakteri *Staphylococcus aureus*”**

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneklusif ini Universitas Lambung Mangkurat berhak menyimpan, mengalihmedia/format-kan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (database), merawat, dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya

Dibuat di : Banjarmasin

Pada tanggal : 6 Mei 2026

Yang menyatakan

  
Anjelita

## RINGKASAN

### **Studi *In Silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) sebagai Antibakteri *Staphylococcus aureus***

Abses odontogenik merupakan infeksi yang sering terjadi pada rongga mulut. Infeksi ini bersifat polimikroba yang melibatkan bakteri aerob, fakultatif, dan anaerob obligat. Salah satu bakteri penyebab abses odontogenik adalah *S. aureus*. Dalam menangani infeksi akibat bakteri, antibiotik menjadi pilihan utama. Penggunaan antibiotik sangat diperlukan, tetapi apabila digunakan secara terus menerus dapat menyebabkan resistensi bakteri. Tumbuhan kecap merupakan salah satu tanaman yang biasa digunakan sebagai obat tradisional dan salah satu bagian tumbuhan ini yang sering digunakan adalah bagian daun. Pada daun kecap terdapat senyawa metabolit sekunder seperti flavonoid, saponin, alkaloid, steroid, fenolik, dan triterpenoid yang berperan sebagai kandungan antibakteri. Berdasarkan hasil uji GC-MS, pada daun kecap terdapat total 30 senyawa dan dari senyawa-senyawa tersebut terdapat 23 senyawa yang strukturnya terdapat pada data bank. Senyawa-senyawa tersebut belum diketahui secara spesifik perannya sebagai antibakteri dan sebagai kandidat senyawa obat baru, maka dari itu perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk mengetahui potensinya. Senyawa pada tumbuhan memiliki potensi yang tinggi untuk dijadikan sebagai obat terutama obat antibakteri. Oleh karena itu, diperlukan uji untuk memprediksi senyawa sebagai kandidat obat baru berdasarkan fisikokimia, farmakokinetika, toksisitas. Uji *molecular docking* juga diperlukan untuk melihat bagaimana aktivitas senyawa sebagai antibakteri secara *in silico*.

Penelitian ini merupakan jenis penelitian eksploratif dengan metode *in silico* untuk menganalisis hasil fisikokimia, farmakokinetika, toksisitas serta analisis aktivitas antibakteri dari senyawa daun kecap terhadap *S. aureus* berdasarkan *binding affinity*, interaksi residu asam amino dan ikatan kimia melalui proses *molecular docking*. Hasil penelitian didapatkan 23 senyawa daun kecap memenuhi lima parameter *Lipinski's Rule of Five* yaitu nilai logP, bobot molekuler, akseptor ikatan hidrogen, dan donor ikatan hidrogen. Dari 23 daun kecap, senyawa dengan farmakokinetika dan toksisitas yang optimal adalah *isoaromadendrene epoxide*, *aristolene epoxide*, *leden oxide*, *beta-cedrene oxide* dan *isolongifolene epoxide*. Toksisitas 23 senyawa daun kecap berada pada kisaran toksisitas kelas 4 hingga kelas 6, hal ini menunjukkan bahwa keseluruhan senyawa diprediksi memiliki profil toksisitas yang aman berdasarkan uji LD50, 1 senyawa dipredik bersifat mutagenik yaitu *naphthalene*, *decahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)* dan 1 senyawa diprediksi hepatotoksik yaitu *methyl commate E*. Kandidat senyawa obat terbaik inhibitor enzim DNA gyrase *S. aureus* adalah *isolongifolene epoxide* yaitu berdasarkan nilai *binding affinity* dan ikatan kimia dan kandidat senyawa obat terbaik inhibitor enzim FabH *S. aureus* adalah *isoaromadendrene epoxide* yaitu berdasarkan nilai *binding affinity*, kesamaan residu asam amino dengan ligan pembanding dan ikatan kimia.

## SUMMARY

### ***In Silico Study of Pharmacokinetic and Toxicity Prediction of Compounds from Kecapi Leaves (Sandoricum koetjape Merr.) as Antibacterial Agents Against Staphylococcus aureus***

*Odontogenic abscesses are a common type of infection in the oral cavity. These infections are polymicrobial in nature, involving aerobic, facultative, and obligate anaerobic bacteria. One of the bacteria responsible for odontogenic abscesses is S. aureus. Antibiotics are the primary treatment for bacterial infections. The use of antibiotics is essential, but continuous use can lead to bacterial resistance. The kecapi plant is one of the plants commonly used in traditional medicine, and the leaves are a frequently utilized part of this plant. Kecapi leaves contain secondary metabolites such as flavonoids, saponins, alkaloids, steroids, phenolics, and triterpenoids, which act as antibacterial agents. Based on GC-MS analysis, a total of 30 compounds were identified in the kecapi leaves, and 23 of these compounds have structures present in the chemical database. The specific roles of these compounds as antibacterial agents and as candidates for new medicinal compounds are not yet known; therefore, further research is needed to determine their potential. Compounds found in plants have high potential to be used as medicines, particularly as antibacterial agents. Therefore, tests are needed to identify compounds as candidates for new drugs based on their physicochemical properties, pharmacokinetics, and toxicity. Molecular docking simulations are also required to assess the compounds' antibacterial activity in silico.*

*This study is an exploratory study using in silico methods to analyze the physicochemical properties, pharmacokinetics, toxicity, and antibacterial activity of compounds derived from kecapi leaves against S. aureus based on binding affinity, amino acid residue interactions, and chemical bonds through molecular docking. The results showed that 23 compounds from kecapi leaves met the five parameters of Lipinski's Rule of Five, namely logP value, molecular weight, hydrogen bond acceptor, and hydrogen bond donor. Of the 23 kecapi leaf compounds, those with optimal pharmacokinetics and toxicity were isoaromadendrene epoxide, aristolene epoxide, ledene oxide, beta-cedrene oxide, and isolongifolene epoxide. The toxicity of 23 compounds from kecapi leaves falls within the range of toxicity classes 4 to 6, indicating that all compounds are predicted to have a safe toxicity profile based on LD50 testing; 1 compound is predicted to be mutagenic, namely naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl), and 1 compound is predicted to be hepatotoxic, namely methyl commate E. The best candidate drug compound for the S. aureus DNA gyrase enzyme inhibitor is Isolongifolene epoxide, based on binding affinity and chemical structure, and the best candidate drug compound for the S. aureus FabH enzyme inhibitor is isoaromadendrene epoxide, based on binding affinity, amino acid sequence similarity with the reference ligand, and chemical structure.*

## ABSTRAK

### **Studi *In Silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) sebagai Antibakteri *Staphylococcus aureus***

**Anjelita, Yusrinie Wasiaturrahmah, Juliyatin Putri Utami**

**Latar Belakang:** *S. aureus* adalah bakteri patogen yang berhubungan dengan infeksi parah dan meningkatnya resistensi antibiotik. Mengeksplorasi senyawa alami yang memiliki potensi antibakteri telah menjadi strategi penting dalam penemuan obat. Daun kecap (*S. koetjape*) diketahui mengandung berbagai senyawa bioaktif, namun profil farmakokinetik dan toksisitasnya sebagai agen antibakteri masih belum banyak diteliti. **Tujuan:** Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi sifat farmakokinetik dan toksisitas senyawa fitokimia dari daun kecap terhadap *S. aureus* menggunakan pendekatan *in silico*. **Metode:** Senyawa bioaktif daun kecap diperoleh dari literatur dan dianalisis untuk memprediksi farmakokinetik dan toksisitas (ADMET) menggunakan pkCSM. Simulasi *molecular docking* dilakukan untuk mengidentifikasi interaksi potensial dengan protein target *S. aureus*, khususnya DNA gyrase dan FabH, guna mendukung skrining aktivitas antibakteri. **Hasil:** 23 senyawa dalam daun kecap memenuhi parameter Aturan Lima Lipinski. Senyawa dengan farmakokinetik optimal adalah *isoaromadendrene epoxide*, *aristolene epoxide*, *ledene oxide*, *beta-cedrene oxide*, dan *isolongifolene epoxide*. Toksisitas senyawa termasuk dalam toksisitas rendah berdasarkan uji LD50, 1 senyawa diprediksi bersifat mutagenik, yaitu *naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)* dan 1 senyawa diprediksi bersifat hepatotoksik, yaitu *methyl commate E*. Kandungan senyawa obat kandidat terbaik sebagai penghambat enzim DNA gyrase *S. aureus* adalah *isolongifolene epoxide*, sedangkan senyawa obat kandidat terbaik sebagai penghambat enzim FabH *S. aureus* adalah *Isoaromadendrene epoxide*. **Kesimpulan:** Berdasarkan hasil penelitian, senyawa dalam daun kecap, terutama senyawa *isolongifolene epoxide* dan *isoaromadendrene epoxide*, dapat digunakan sebagai kandidat obat antibakteri baru untuk *S. aureus* berdasarkan uji farmakokinetik, toksisitas, dan *molecular docking*.

**Kata Kunci:** *daun kecap, farmakokinetik, toksisitas, penambatan molekuler, antibakteri*

## ABSTRACT

### *In Silico Study of Pharmacokinetic and Toxicity Prediction of Compounds from Kecapi Leaves (Sandoricum koetjape Merr.) as Antibacterial Agents Against Staphylococcus aureus*

**Anjelita, Yusrinie Wasiaturrehmah, Juliyatin Putri Utami**

**Background:** *S. aureus* is a pathogenic bacterium associated with severe infections and increasing antibiotic resistance. Exploring natural compounds with antibacterial potential has become an important strategy in drug discovery. Kecapi leaves (*S. koetjape*) is known to contain various bioactive compounds, yet its pharmacokinetic and toxicity profiles as an antibacterial agent remain underexplored. **Objective:** This study aimed to evaluate the pharmacokinetic properties and toxicity of phytochemical compounds from kecapi leaves against *S. aureus* using an *in silico* approach. **Methods:** Bioactive compounds of kecapi leaves were obtained from literature and subjected to pharmacokinetic and toxicity (ADMET) prediction using pkCSM. Molecular docking simulations were conducted to identify potential interactions with *S. aureus* target proteins, particularly DNA gyrase and FabH, to support antibacterial activity screening. **Result:** 23 compounds in kecapi leaves meet the parameters of Lipinski's Rule of Five. The compounds that show optimal pharmacokinetic properties are isoaromadendrene epoxide, aristolene epoxide, leden oxide, beta-cedrene oxide, and isolongifolene epoxide. Based on the LD50 test, most compounds exhibit low toxicity. One compound, naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl), is predicted to be mutagenic, while another compound, methyl commate E, is predicted to be hepatotoxic. Molecular docking analysis identifies isolongifolene epoxide as a candidate inhibitor of the DNA gyrase enzyme of *S. aureus*, whereas isoaromadendrene epoxide emerges as a candidate inhibitor of the FabH enzyme of *S. aureus*. **Conclusion:** Based on pharmacokinetic, toxicity, and molecular docking analyses, compounds in kecapi leaves, particularly isolongifolene epoxide and isoaromadendrene epoxide, demonstrate potential as novel antibacterial drug candidates against *S. aureus*.

**Keywords:** *kecapi leaves, pharmacokinetic, toxicity, molecular docking, antibacterial*

## KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “**Studi *In Silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) sebagai Antibakteri *Staphylococcus aureus*”**”, tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat sarjana kedokteran gigi di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada:

Dekan Fakultas Kedokteran Gigi, prof. Dr. drg. Maharani Laillyza Apriasari, Sp.PM yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Koordinator program studi Kedokteran Gigi drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Kedua dosen pembimbing apt. Yusrinie Wasiaturrehman, S.Farm., M.Farm dan Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed yang berkenan memberikan saran dan arahan dalam penyelesaian karya tulis ilmiah ini.

Kedua dosen penguji drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si dan drg. Melisa Budipramana, Sp. Ort., M.Imun yang memberikan kritik dan saran sehingga karya tulis ilmiah ini menjadi semakin baik.

Seluruh dosen dan staf pengajar di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat yang telah mendidik, membantu dan memberikan masukan kepada penulis selama menjalani masa pendidikan dan menyelesaikan skripsi ini.

Kedua orang tua penulis, Yoseph dan Helita, adik penulis Chrisnatha Gavrilano Putra, serta keluarga penulis yang tidak bisa disebutkan satu per satu yang selalu memberikan perhatian dan dukungan penuh baik secara materil, motivasi, harapan, dan doa sampai terselesaikannya skripsi ini. Besar harapan penulis untuk bisa memenuhi dan menjadi seperti apa yang diinginkan oleh kedua orang tua penulis.

Sahabat penulis dan teman dekat penulis, Karina Amalia, Khansa Khoirun Nisa, Amalia Rizky Fadillah, dan Ardika Oktavianus Putra yang selalu memberikan waktu untuk berkeluh kesah, menghibur, serta memberikan motivasi sehingga skripsi ini dapat berjalan dan selesai dengan baik

Semua rekan seperjuangan, Enamel angkatan 2022 yang selalu kebersamai selama masa-masa kuliah

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

Banjarmasin, 6 Mei 2026



Anjelita

## DAFTAR ISI

	Halaman
<b>HALAMAN SAMPUL</b> .....	<b>i</b>
<b>HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI</b> .....	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI</b> ....	Error! Bookmark not defined.
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS</b> .....	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS</b> .....	<b>vi</b>
<b>RINGKASAN</b> .....	<b>vii</b>
<b>SUMMARY</b> .....	<b>viii</b>
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>ix</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>x</b>
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR SINGKATAN</b> .....	<b>xvi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xvii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xviii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	<b>xx</b>
<b>BAB 1 PENDAHULUAN</b> .....	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	5
1.3 Tujuan Penelitian .....	5
1.3.1 Tujuan Umum .....	5
1.3.2 Tujuan Khusus .....	5
1.4 Manfaat Penelitian .....	6
1.4.1 Manfaat Teoritis .....	6
1.4.2 Manfaat Praktis .....	6
1.4.3 Manfaat bagi masyarakat .....	6
<b>BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>7</b>
2.1 Abses Odontogenik .....	7
2.2 <i>Staphylococcus aureus</i> .....	8

2.3 Tumbuhan Kecapi .....	10
2.3.1 Kandungan Daun Kecapi .....	12
2.3.2 Manfaat Daun Kecapi .....	14
2.4 Ciprofloxacin.....	15
2.5 4-chloro-N-[cyclopropylmethyl(methanoylamino)methyl]benzamide (OAX) .....	16
2.6 <i>In silico</i> .....	16
2.6.1 Fisikokimia .....	17
2.6.2 Farmakokinetika.....	19
2.6.3 Toksisitas .....	21
2.6.4 <i>Molecular Docking</i> .....	22
2.7 Kerangka Teori.....	23
<b>BAB 3 KERANGKA KONSEP DAN HIPOTESIS .....</b>	<b>26</b>
3.1 Kerangka Konsep .....	26
3.2 Hipotesis.....	26
<b>BAB 4 METODE PENELITIAN .....</b>	<b>27</b>
4.1 Rancangan Penelitian .....	27
4.2 Variabel Penelitian .....	27
4.2.1 Variabel Bebas .....	27
4.2.2 Variabel Terikat .....	28
4.2.3 Definisi Operasional .....	28
4.3 Bahan Penelitian.....	34
4.3.1 Senyawa Daun Kecapi .....	34
4.4 Alat Penelitian.....	40
4.5 Tempat dan Waktu Penelitian .....	41
4.6 Prosedur Penelitian.....	41
4.6.1 Pengunduhan Reseptor.....	41
4.6.2 Pengunduhan Ligan.....	41
4.6.3 Preparasi Reseptor.....	42
4.6.4 Persiapan Ligan.....	42
4.6.5 Uji ADMET .....	43
4.6.6 Validasi Metode <i>Docking</i> .....	43
4.6.7 <i>Molecular Docking</i> .....	44
4.6.8 Visualisasi Hasil <i>Docking</i> .....	45

4.6.9 Alur Penelitian .....	47
4.7 Prosedur Pengambilan dan Pengumpulan Data .....	48
4.8 Cara Analisis Data.....	48
<b>BAB 5 HASIL PENELITIAN .....</b>	<b>49</b>
5.1 Data dan Analisis Hasil Penelitian.....	49
<b>BAB 6 PEMBAHASAN .....</b>	<b>74</b>
6.1 Uji <i>Drug-Likeness</i> dan ADMET .....	74
6.2 <i>Molecular Docking</i> .....	80
6.2.1 Ligan Uji dengan DNA Gyrase <i>Staphylococcus aureus</i> .....	80
6.2.2 Ligan Uji dengan FabH <i>Staphylococcus aureus</i> .....	83
<b>BAB 7 PENUTUP.....</b>	<b>87</b>
7.1 Kesimpulan .....	87
7.2 Saran.....	88
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	
<b>LAMPIRAN</b>	

## DAFTAR SINGKATAN

KHM : Kadar Hambat Minimum

KBM : Kadar Bunuh Minimum

*RO5* : *Rule of Five*

ADMET : Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas

*SMILES* : *Simplified Molecular Input Line Entry System*

*VDss* : *Volume Distribusi at Steady State*

*BBB* : *Blood-Brain Barrier*

## DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
2.1	Senyawa Pada Daun Kecapi ( <i>Sandoricum koetjape</i> Merr.) Yang Berpotensi Sebagai <i>Antibakteri</i> .....	13
4.1	Definisi Operasional Penelitian.....	28
4.2	Senyawa Pada Daun Kecapi Yang Berpotensi Sebagai Senyawa Antibakteri dan Senyawa Pembanding Yang Digunakan Pada Penelitian.....	34
4.3	Keterangan Identitas Protein Target DNA gyrase <i>Staphylococcus aureus</i> .....	38
4.4	Keterangan Identitas Protein Target FabH <i>Staphylococcus aureus</i> .....	39
5.1	Tabel Hasil uji fisikokimia senyawa pada daun kecap (Sandoricum koetjape Merr.) secara <i>in silico</i> .....	50
5.2	Tabel Hasil uji farmakokinetika senyawa pada daun kecap (Sandoricum koetjape Merr.) secara <i>in silico</i> .....	52
5.3	Tabel Hasil uji toksisitas senyawa pada daun kecap (Sandoricum koetjape Merr.) secara <i>in silico</i> .....	56
5.4	Tabel Hasil uji <i>molecular docking</i> senyawa pada daun kecap terhadap Reseptor DNA gyrase <i>Staphylococcus aureus</i> dan FabH <i>Staphylococcus Aureus</i> .....	59

## DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
2.1	(A) Pohon Kecapi (B) Daun Kecapi .....	12
2.2	Kerangka Teori Studi <i>In silico</i> Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi ( <i>Sandoricum koetjape</i> Merr.) Sebagai Antibakteri.....	23
4.1	Struktur 3D DNA gyrase <i>Staphylococcus aureus</i> .....	38
4.2	Struktur 3D FabH <i>Staphylococcus aureus</i> .....	39
4.3	Skema Alur Penelitian Studi <i>In silico</i> Studi <i>In silico</i> Prediksi Farmakokinetika Dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi ( <i>Sandoricum koetjape</i> Merr.) Sebagai Antibakteri.....	47
5.1	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Isoaromadendrene epoxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Isoaromadendrene epoxide</i> dengan DNA gyrase <i>S.aureus</i> .....	63
5.2	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Aristolene epoxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Aristolene epoxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> .....	64
5.3	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Ledene oxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Ledene oxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> .....	64
5.4	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking beta-Cedrene oxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking beta-Cedrene oxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> .....	65
5.5	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Isolongifolene epoxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Isolongifolene epoxide</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> .....	66
5.6	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Ciprofloxacin</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Ciprofloxacin</i> dengan DNA gyrase <i>S.aureus</i> .....	66
5.7	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Isoaromadendrene epoxide</i> dengan FabH <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Isoaromadendrene epoxide</i> dengan FabH <i>S.aureus</i> .....	67
5.8	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Aristolene epoxide</i> dengan Fabh <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Aristolene epoxide</i> dengan Fabh <i>S. aureus</i> .....	68
5.9	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Ledene oxide</i> dengan FabH <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Ledene oxide</i> dengan FabH <i>S.aureus</i> .....	68
5.10	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking beta- Cedrene oxide</i> dengan FabH <i>S. aureus</i> <b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking beta-Cedrene oxide</i> dengan Fabh <i>S.aureus</i> .....	69

<b>5.11</b>	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking Isolongifolene epoxide</i> dengan FabH <i>S. aureus</i>	
	<b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking Isolongifolene epoxide</i> dengan Fabh <i>S.aureus</i> .....	70
<b>5.12</b>	<b>A.</b> Struktur 3D Hasil <i>Docking 4- chloro- N- [cyclopropylmethyl(methanoyl amino)methyl]benzamide (OAX)</i> dengan DNA gyrase <i>S. aureus</i>	
	<b>B.</b> Struktur 2D Hasil <i>Docking 4- chloro- N- [cyclopropylmethyl(meth anoylamino)methyl]benzamide (OAX)</i> dengan DNA gyrase <i>S.aureus</i> ..	70

## DAFTAR LAMPIRAN

### Lampiran

1. Jadwal Kegiatan Penelitian Studi *In silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) Sebagai Antibakteri *Staphylococcus aureus*
2. Rincian Biaya Penelitian Studi *In silico* Prediksi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa Daun Kecapi (*Sandoricum koetjape* Merr.) Sebagai Antibakteri *Staphylococcus aureus*
3. Dokumentasi Proses Uji ADMET
4. Hasil *Molecular Docking* DNA gyrase *S. aureus* dengan Ligan Uji
5. Hasil *Molecular Docking* Fabh *S. aureus* dengan Ligan Uji
6. Dokumentasi Proses Visualisasi Hasil *Docking*