



**PROFIL GC-MS METABOLIT SEKUNDER DARI *Enterobacter cloacae*  
ULM-F2 DAN POTENSINYA SEBAGAI ANTIBAKTERI**

**SKRIPSI**

**untuk memenuhi persyaratan  
dalam menyelesaikan program sarjana Strata-1 Kimia**

**Oleh:**

**DIMAS GUNAWAN YULIANTO**

**NIM 2111012310007**

**PROGRAM STUDI S-1 KIMIA  
JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
BANJARBARU  
JANUARI 2025**

# SKRIPSI

## Profil GC-MS Metabolit Sekunder dari *Enterobacter cloacae* ULM-F2 dan Potensinya Sebagai Antibakteri

Oleh:

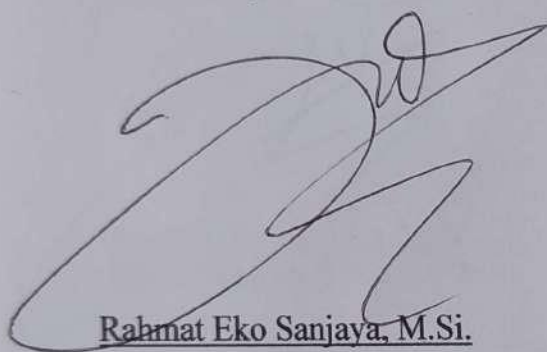
**DIMAS GUNAWAN**

**NIM 2111012310007**

telah dipertahankan di depan Dosen Penguji pada tanggal 10 Januari 2025

Susunan Dosen Penguji:

Pembimbing I



Rahmat Eko Sanjaya, M.Si.  
NIP. 199112282022031009

Dosen Penguji:

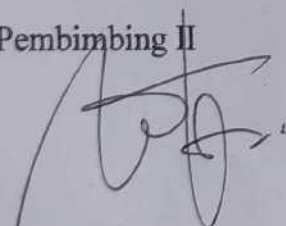
1. Azidi Irywan, S.Si., M.Si.

(.....)

2. Aulia Rhamdani Arfan, S.Si., M.Si.

(.....)

Pembimbing II



Dr. Muddatstsir Idris S.Si. M.S.  
NIP. 197408162006041002

Banjarbaru, 21 Januari 2025

Program Studi Kimia FMIPA ULM

Koordinator,



Ahmad Budi Junaidi, S.Si., M.Sc

NIP. 19760304 200112 1 003

## **PERNYATAAN**

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, 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.

Banjarbaru, 10 Januari 2025

Yang menyatakan,



Dimas Gunawan

Nim. 2111012310007

## ABSTRAK

**PROFIL GC-MS METABOLIT SEKUNDER DARI *ENTEROBACTER CLOACAE* ULM-F2 DAN POTENSI SEBAGAI ANTIBAKTERI** (Oleh: Dimas Gunawan; Pembimbing: Rahmat Eko Sanjaya, M.Si dan Dr. Muddatstsir Idris S.Si. M.S; Januari 2025; 69 Halaman)

Seiring dengan meningkatnya resistensi bakteri terhadap antibiotik, pencarian senyawa antibakteri alami oleh mikroorganisme menjadi semakin penting. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi potensi *E. cloacae* ULM-F2 sebagai sumber alami penghasil kandidat senyawa antibakteri sebagai pengembangan obat terhadap resistensi bakteri. Isolasi metabolit sekunder dilakukan dengan ekstraksi cair-cair menggunakan etil asetat dan senyawa yang terkandung dianalisis menggunakan GC-MS. Hasil GC-MS menunjukkan terdapat 90 senyawa dengan lima senyawa terpilih berdasarkan persen area dan skor kesamaan struktur pada pangkalan data. Lima senyawa terpilih tersebut adalah Pirolo[1,2-a]pirazin-1,4-dion,heksahidro-3(2-metilpropil); Siklo(L-prolil-L-valin); Heksahidro-3-(1-metilpropil)pirolo[1,2-a]pirazin-1,4-dion; Bis(2-etilheksil) ftalat; Benzena metanol,  $\alpha$ -metil. Aktivitas antibakteri dari lima senyawa tersebut dievaluasi menggunakan pendekatan *in silico* melalui metode penambatan molekuler terhadap empat reseptor terpilih, yaitu reseptor dengan PDB ID 1W1P, 3ZMI, 2R6R dan IJIL. Kelima senyawa memiliki potensi antibakteri terhadap reseptor kitinase B asal *Serratia marcescens* (PDB ID 1W1P), dengan senyawa Pirolo[1,2-a]pirazin-1,4-dion, heksahidro-3-(2-metilpropil) memberikan energi ikat terbaik dan konstanta inhibisi ( $K_i$ ) yang rendah, serta profil farmakokinetik yang memenuhi kriteria ADME dan toksitas yang rendah. Hasil ini menunjukkan bahwa ekstrak etil asetat metabolit sekunder asal *Enterobacter cloacae* ULM-F2 memiliki potensi sebagai kandidat antibakteri.

**Kata kunci:** *Enterobacter cloacae* ULM-F2, metabolit sekunder, GC-MS, antibakteri, penambatan molekuler.

## ABSTRACT

**GC-MS PROFILE OF SECONDARY METABOLITES FROM ENTEROBACTER CLOACAE ULM-F2 AND ITS ANTIBACTERIAL POTENTIAL** (By: Dimas Gunawan; Supervisor: Rahmat Eko Sanjaya, M.Si and Dr. Muddatstsir Idris S.Si. M.S.; January 2025; 69 pages)

*As bacterial resistance to antibiotics continues to rise, the search for natural antibacterial compounds from microorganisms becomes increasingly important. Therefore, this study aims to identify the potential of E. cloacae ULM-F2 as a natural source for producing antibacterial compound candidates as a drug development effort against bacterial resistance. Secondary metabolite isolation was carried out using liquid-liquid extraction with ethyl acetate, and the compounds were analyzed using GC-MS. GC-MS results identified 90 compounds, with five selected based on their percentage area and structural similarity scores from the database. The five selected compounds are Pyrrolo [1,2-a]pyrazine-1,4-dione, hexahydro-3-(2-methylpropyl); Cyclo (L-prolyl-L-valine); Hexahydro-3-(1-methylpropyl) pyrrolo[1,2-a]pyrazine -1,4-dione; Bis (2-ethyl hexyl) phthalate; and Benzenemethanol,  $\alpha$ -methyl. The antibacterial activity of these five compounds was evaluated using an in silico approach through molecular docking against four selected receptors, namely those with PDB IDs 1W1P, 3ZMI, 2R6R, and IJIL. All five compounds showed antibacterial potential against the chitinase B receptor of Serratia marcescens (PDB ID 1W1P), with Pyrrolo[1,2-a]pyrazine-1,4-dione, hexahydro-3- (2-methylpropyl) exhibiting the best binding energy and low inhibition constant ( $K_i$ ), along with a pharmacokinetic profile that meets ADME criteria and low toxicity. These findings indicate that the ethyl acetate extract of secondary metabolites from Enterobacter cloacae ULM-F2 holds potential as an antibacterial candidate.*

**Keywords:** *Enterobacter cloacae ULM-F2, secondary metabolites, GC-MS, antibacterial, molecular docking.*

## PRAKATA

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat serta karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Profil GC-MS Metabolit Sekunder dari Enterobakter Cloacae ULM-F2 dan Potensi Sebagai Antibakteri”. Penyusunan skripsi ini tidak akan terselesaikan tanpa adanya bantuan, dukungan, serta kemurahan hati berbagai pihak. Oleh sebab itu penulis mengucapkan terima kasih sebesar-besarnya kepada:

1. Rahmat Eko Sanjaya, M.Si. selaku Dosen Pembimbing I dan Dr. Muddatstsir Idris S.Si. M.S. selaku Dosen Pembimbing II yang telah bersedia membimbing penulis dari awal penelitian hingga akhir penelitian.
2. Azidi Irwan, S.Si., M.Si. selaku Ketua Dosen Penguji dan Aulia Rhamdani Arfan, S.Si., M.Si. selaku Anggota Dosen Penguji.
3. Bapak/Ibu Dosen Kimia FMIPA ULM yang telah memberikan pengajaran dan dukungan kepada saya.
4. Keluarga yang selalu berada dalam suka dan duka, serta selalu memberikan dukungan, materi serta doa-doa yang tiada hentinya dipanjatkan sehingga saya dapat menyelesaikan studi S-1 ini.
5. Teman-teman Magnesium 21 yang telah menemani hari-hari saya selama masa perkuliahan yang selalu membantu dan memberikan motivasi.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan skripsi ini masih belum sempurna karena keterbatasan pengetahuan dan pengalaman yang dimiliki penulis. Oleh karena itu berbagai kritik dan saran yang bersifat membangun sangat penulis harapkan untuk perbaikan penulisan selanjutnya.

Banjarbaru, 10 Januari 2025



Dimas Gunawan

NIM 2111012310007

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN.....	iii
ABSTRAK.....	iv
ABSTRACT.....	v
PRAKATA.....	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL.....	ix
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
<b>BAB I PENDAHULUAN.....</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	2
1.3 Tujuan.....	3
1.4 Manfaat.....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....</b>	<b>4</b>
2.1 <i>Enterobacter cloacae</i> .....	4
2.2 Metabolit Sekunder pada Bakteri.....	4
2.3 Reseptor Antibakteri.....	6
2.3.1 3ZMI.....	7
2.3.2 1W1P.....	8
2.3.3 1JIL.....	8
2.3.4 2R6R.....	8
2.4 Penambatan Molekuler.....	9
2.5 Swiss ADME.....	10
<b>BAB III METODE PENELITIAN.....</b>	<b>12</b>
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	12
3.2 Alat.....	12
3.3 Bahan.....	12
3.4 Prosedur Kerja.....	13
3.4.1 Penentuan Kurva Pertumbuhan Bakteri.....	13

3.4.2 Isolasi Metabolit Sekunder .....	13
3.4.3 Penambatan Molekuler .....	14
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>16</b>
4.1 Kurva Pertumbuhan <i>Enterobacter cloacae</i> ULM-F2.....	16
4.2 Profil GC-MS Ekstrak Etil Asetat Metabolit Sekunder <i>Enterobakter cloacae</i> ULM-F2.....	19
4.3 Potensi Ekstrak EtOAc <i>Enterobacter cloacae</i> ULM-F2 Sebagai Antibakteri.....	22
4.4 Uji Farmakokinetik, Toksisitas dan Prediksi Sifat Obat .....	28
<b>BAB V PENUTUP .....</b>	<b>35</b>
5.1 Kesimpulan.....	35
5.2 Saran.....	35
DAFTAR PUSTAKA .....	36
LAMPIRAN .....	43

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>	<b>Halaman</b>
1. Data OD pertumbuhan bakteri .....	16
2. Identifikasi senyawa terpilih ekstrak EtOAc metabolit sekunder <i>Enterobacter cloacae</i> ULM-F2.....	21
3. Senyawa ekstrak EtOAc dari <i>Enterobacter cloacae</i> ULM-F2.....	22
4. Energi pengikatan lima senyawa uji terhadap reseptor .....	23
5. Nilai ( $\Delta G$ ) dan $K_i$ hasil penambatan ligan alami dan senyawa uji pada reseptor 1W1P .....	25
6. Interaksi senyawa uji terhadap reseptor kitinase B asal <i>Serratia marcescens</i> (PDB ID 1W1P).....	26
7. Sifat farmakokinetik dari setiap senyawa uji.....	28
8. Sifat toksisitas dari setiap senyawa uji .....	30
9. Prediksi sifat obat dari senyawa uji .....	31

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar</b>	<b>Halaman</b>
1. Kurva Pertumbuhan Bakteri.....	17
2. Kromatogram GC-MS Ekstrak EtOAc Metabolit Sekunder dari <i>Enterobakter cloacae</i> ULM-F2.....	21
3. Visualisasi 2D interaksi antara ligan alami dan senyawa uji pada reseptor 1W1P.....	28

## DAFTAR LAMPIRAN

<b>Lampiran</b>	<b>Halaman</b>
1. Diagram alur penelitian .....	43
2. Hasil analisis GC-MS .....	46
3. Hasil penambatan molekuler dalam format dlq.....	50
4. Tangkapan layar hasil penambatan ulang ligan alami terhadap reseptor .....	51
5. Visualisasi superposisi ligan alami pada proses penambatan ulang ( <i>redocking</i> ) untuk mendapatkan parameter penambatan .....	55
6. Dokumentasi penelitian .....	56