



**STUDI *IN SILICO* POTENSI ANTIBAKTERI
FITOKIMIA GAHARU (*Aquilaria malaccensis L.*)**

**Senyawa α -agarofuran, 10-epi- γ -eudesmol, dan Agarospirol
Minyak Atsiri Gaharu (*Aquilaria malaccensis L.*) Terhadap α -
toksin, θ -toksin, dan Kolagenase Bakteri *Clostridium perfringens***

Skripsi

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

Oleh

Auryn Widyananda Sindunata
2110911220036

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

Desember 2024

PENGESAHAN SKRIPSI

STUDI *IN SILICO* POTENSI ANTIBAKTERI FITOKIMIA
GAHARU (*Aquilaria malaccensis* L.)

Senyawa α -agarofuran, 10-epi- γ -eudesmol, dan Agarospirol
Minyak Atsiri Gaharu (*Aquilaria malaccensis* L.) Terhadap
 α -toksin, θ -toksin, dan Kolagenase Bakteri *Clostridium perfringens*

Auryn Widyananda Sindunata, NIM: 2110911220036

Telah dipertahankan di hadapan Dewan Penguji Skripsi
Program Studi Kedokteran Program Sarjana
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan
Universitas Lambung Mangkurat
Pada Hari Senin, Tanggal 9 Desember 2024

Pembimbing I

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

Pembimbing II

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

Penguji I

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

Penguji II

Nama: Prof. Dr. drs. Eko Suhartono, M.Si
NIP : 196809071993031004

Banjarmasin, 20 Desember 2024
Mengetahui,
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana



Dr. dr. Didik Dwi Sanyoto, M.Kes., M.Med.Ed
NIP: 197203071997021002

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, 22 November 2024



Aurny Widyananda Sindunata

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* POTENSI ANTIBAKTERI FITOKIMIA GAHARU (*Aquilaria malaccensis L.*)

**Senyawa α -agarofuran, 10-epi- γ -eudesmol, dan Agarospirol
Minyak Atsiri Gaharu (*Aquilaria malaccensis L.*) Terhadap α -
toksin, θ -toksin, dan Kolagenase Bakteri *Clostridium perfringens***

Auryn Widyananda Sindunata

Clostridium perfringens merupakan jenis bakteri gram positif berbentuk batang dan anaerobik. *Clostridium perfringens* mengeluarkan enzim α -toksin, θ -toksin (PFO), dan kolagenase yang berperan dalam proses putrefaksi. Saat ini, beberapa senyawa metabolit sekunder dinilai memiliki aktivitas antibakteri dan dibuktikan oleh beberapa penelitian. Senyawa sesquiterpen gaharu (*Aquilaria malaccensis L.*) memiliki aktivitas antibakteri, senyawa yang dipilih adalah α -agarofuran, 10-epi- γ -eudesmol, dan agarospirol. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa gaharu tersebut dalam menghambat kerja enzim dan toksin yang dikeluarkan *Clostridium perfringens*. Pencarian senyawa melalui PubChem. Pencarian enzim dan toksin melalui RCSB *database* dan AlphaFold. *Docking* dilakukan menggunakan *software* AutoDock Vina. Hasil *molecular docking* didapatkan nilai *binding affinity* paling negatif pada agarospirol terhadap enzim kolagenase -7.0 Kcal/mol. Ketiga senyawa tersebut terhadap θ -toksin (PFO) dan kolagenase memiliki kesamaan residu asam amino pada ikatan hidrofobik yang berperan dalam menstabilkan ikatan. Kesimpulan didapatkan ketiga senyawa tidak memiliki potensi dalam menghambat α -toksin, tetapi memiliki potensi menjadi senyawa kandidat untuk menghambat kolagenase. Sedangkan yang dapat menjadi kandidat dalam menghambat θ -toksin (PFO) hanya senyawa 10-epi- γ -eudesmol dan agarospirol.

Kata-kata kunci: gaharu, *Clostridium perfringens*, *molecular docking*

ABSTRACT

IN SILICO STUDY OF THE ANTIBACTERIAL POTENTIAL OF PHYTOCHEMICAL AGARWOOD (*Aquilaria malaccensis* L.)

Compounds α -agarofuran, 10-epi- γ -eudesmol, and Agarospirol Essential Oil of Agarwood (*Aquilaria malaccensis* L.) Against α -toxin, θ -toxin, and Collagenase of *Clostridium perfringens* Bacteria

Auryn Widyananda Sindunata

Clostridium perfringens is a type of rod-shaped and anaerobic gram-positive bacteria. *Clostridium perfringens* secretes the enzymes α -toxin, θ -toxin (PFO), and collagenase which play a role in the putrefaction process. Currently, several secondary metabolite compounds are considered to have antibacterial activity and this has been proven by several studies. Agarwood sesquiterpene compounds (*Aquilaria malaccensis* L.) have antibacterial activity, the compounds chosen were α -agarofuran, 10-epi- γ -eudesmol, and agarospirol. This research aims to determine the potential of agarwood compounds in inhibiting the action of enzymes and toxins released by *Clostridium perfringens*. Compound search via PubChem. Search for enzymes and toxins via RCSB database and AlphaFold. Docking is carried out using AutoDock Vina software. The results of molecular docking showed that the binding affinity value was the most negative for agarospirol against the collagenase enzyme -7.0 Kcal/mol. These three compounds against θ -toxin (PFO) and collagenase have the same amino acid residues in the hydrophobic bond which play a role in stabilizing the bond. The conclusion was that the three compounds did not have the potential to inhibit α -toxin, but had the potential to become candidate compounds to inhibit collagenase. Meanwhile, the only compounds that can be candidates for inhibiting θ -toxin (PFO) are 10-epi- γ -eudesmol and agarospirol.

Keywords: agarwood, *Clostridium perfringens*, molecular docking

KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **"STUDI *IN SILICO* POTENSI ANTIBAKTERI FITOKIMIA GAHARU (*Aquilaria malaccensis L.*)"**, 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 terima kasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan, Prof. Dr. dr. Syamsul Arifin, M.Pd., FISPH, FISCAM yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana, Dr. dr. Didik Dwi Sanyoto, M.Kes., M.Med.Ed yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
3. Kedua pembimbing, dr. Nila Nirmalasari, M.Sc, M.H, Sp.F dan Dr. dr. Oski Iliandri, M.Kes yang berkenan senantiasa selalu memberikan arahan, bimbingan, dan saran selama pengerjaan dan penyelesaian skripsi.
4. Kedua dosen penguji, Dr. Iwan Aflanie, dr., M.Kes., Sp.F., SH dan Prof. Dr. drs. Eko Suhartono, M.Si yang memberi kritik dan saran yang membangun sehingga skripsi ini menjadi lebih baik.

5. Orang tua penulis, Lukman Sindunata (Alm) dan Emiliana Sumarna serta saudara kandung penulis Nicholas Widyadhana Sindunata serta seluruh keluarga besar yang tidak pernah berhenti memberikan semangat, doa, dan dukungan moral demi kelancaran penyusunan skripsi ini.
6. Rekan penelitian penulis, Danita Selina Febrianti dan Muhammad Fahreza Anantya yang telah memberikan bantuan, sumbangan pikiran, semangat sejak awal, dan bekerja sama baik suka maupun duka selama proses penelitian hingga penulisan skripsi.
7. Sahabat penulis, Putri Khairunnisa, Siti Nurhaliza, dan Hamdanah yang selalu memberikan semangat, bantuan, serta mendengarkan keluh kesah selama proses penyusunan skripsi ini.
8. Teman dekat penulis, Raura, Inezca, Rohana, Gege, Marcel, Dymas, Ambi, dan teman-teman lain yang telah memberikan semangat, serta Fahdy dan Kak Devina yang telah mengajarkan proses penelitian ini.

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

Banjarmasin, Desember 2024

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
Halaman judul	i
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
DAFTAR SINGKATAN	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang Masalah.....	1
B. Rumusan Masalah	4
C. Tujuan Penelitian	5
D. Manfaat Penelitian	5
E. Keaslian Penelitian.....	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	8
A. Pembusukan dan Proses Putrefaksi.....	8
B. Bakteri <i>Clostridium perfringens</i>	10
C. Gaharu (<i>Aquilaria malaccensis L.</i>)	16
D. Metode In Silico.....	20
E. Software Pendukung	22

BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS	24
A. Landasan Teori.....	24
B. Hipotesis.....	26
BAB IV METODE PENELITIAN	27
A. Rancangan Penelitian	27
B. Data Penelitian	27
C. Alat Penelitian.....	29
D. Variabel Penelitian.....	30
E. Definisi Operasional.....	30
F. Prosedur Penelitian.....	32
G. Cara Analisis Data.....	33
H. Tempat dan Waktu Penelitian	33
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	34
A. Hasil	34
B. Pembahasan.....	44
BAB VI PENUTUP	53
A. Simpulan	53
B. Saran.....	53
LAMPIRAN.....	63