



# **ANALISIS *IN SILICO* INHIBISI MOLEKULER NEURAMINIDASE INFLUENZA DENGAN SENYAWA AKTIF HASIL FERMENTASI DARI CAMPURAN MADU HUTAN DAN BAWANG PUTIH**

**MOHAMMAD THAARIQ ADLWA**



**DEPARTEMEN BIOKIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
INSTITUT PERTANIAN BOGOR  
BOGOR  
2026**



### *@Hak cipta milik IPB University*

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

## PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Analisis *In Silico* Inhibisi Molekuler Neuraminidase Influenza Dengan Senyawa Aktif Hasil Fermentasi Dari Campuran Madu Hutan Dan Bawang Putih” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Februari 2026

Mohammad Thaariq Adlwa  
G8401221027

@Hak cipta milik IPB University

IPB University





### *@Hak cipta milik IPB University*

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

## ABSTRAK

MOHAMMAD THAARIQ ADLWA. Analisis *In Silico* Inhibisi Molekuler Neuraminidase Influenza Dengan Senyawa Aktif Hasil Fermentasi Dari Campuran Madu Hutan Dan Bawang Putih. Dibimbing oleh UKHRADIYA MAGHARANIQ SAFIRA PURWANTO dan I MADE ARTIKA.

Neuraminidase merupakan struktur enzim membran pada influenza yang membantu menginfeksi sel inang. Neuraminidase diduga dapat diinhibisi oleh fermentasi madu hutan dan bawang putih. Penelitian ini bertujuan menentukan senyawa bioaktif fermentasi madu dan bawang putih dengan analisis *Liquid Chromatography Mass Spectrometry* (LC-MS) dan mengidentifikasi interaksi inhibisi molekuler senyawa bioaktif terhadap neuraminidase melalui *molecular docking*. Madu hutan dan bawang putih difermentasi selama 31 hari, diekstraksi dengan etanol 70%, dianalisis dengan LC-MS, dan dianalisis secara *in silico* dengan parameter Lipinski *Rules of 5*, ADMET, dan prediksi bioaktivitasnya terhadap influenza. Diperoleh 36 senyawa dari analisis LC-MS, dengan senyawa 5-(diaminomethylideneamino)-2-[5-(5-methyl-2,4-dioxypyrimidin-1-yl)pentoxycarbonylamino]pentanoic acid; 4-[(5-methyl-7-phenyl-4,7-dihydro-[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-2-yl) amino]-4-oxobutanoic acid; dan Trimethyleneglykol-digalloat memiliki kemampuan inhibisi terbaik terhadap neuraminidase.

Kata kunci: bawang putih, influenza, madu hutan, *molecular docking*, neuraminidase

## ABSTRACT

MOHAMMAD THAARIQ ADLWA. *In Silico* Analysis of Molecular Interactions Between Influenza Neuraminidase and Active Compounds Derived from Fermentation of Forest Honey and Garlic Mixture. Supervised by UKHRADIYA MAGHARANIQ SAFIRA PURWANTO and I MADE ARTIKA.

Neuraminidase is a membrane enzyme structure of influenza that facilitates infection of the host cell. It is suspected that neuraminidase can be inhibited by the fermentation of forest honey and garlic. This study aimed to determine the bioactive compounds present in fermented forest honey and garlic using Liquid Chromatography–Mass Spectrometry (LC-MS) analysis and to identify molecular inhibition interactions between the bioactive compounds and neuraminidase through *in silico* molecular docking. Forest honey and garlic were fermented for 31 days, extracted with 70% ethanol, analyzed by LC-MS, and evaluated *in silico* parameters on Lipinski's Rule of 5, ADMET, and bioactivity prediction against influenza. A total of 36 compounds were identified by LC-MS analysis, including 5-(diaminomethylideneamino)-2-[5-(5-methyl-2,4-dioxypyrimidin-1-yl)pentoxycarbonylamino]pentanoic acid; 4-[(5-methyl-7-phenyl-4,7-dihydro-[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-2-yl)amino]-4-oxobutanoic acid; and Trimethyleneglycol-digalloate demonstrated the best inhibitory potential against neuraminidase.

Keywords: forest honey, garlic, influenza, molecular docking, neuraminidase



@Hak cipta milik IPB University

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
    - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
    - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
  2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 20XX

Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

*Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.*

*Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.*



# **ANALISIS *IN SILICO* INHIBISI MOLEKULER NEURAMINIDASE INFLUENZA DENGAN SENYAWA AKTIF HASIL FERMENTASI DARI CAMPURAN MADU HUTAN DAN BAWANG PUTIH**

**MOHAMMAD THAARIQ ADLWA**

Skripsi

sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana pada  
Program Studi Biokimia

**DEPARTEMEN BIOKIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
INSTITUT PERTANIAN BOGOR  
BOGOR  
2026**



**@Hak cipta milik IPB University**

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

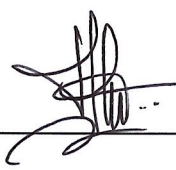
Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

- 1 Rini Kurniasih, S.Si., M.Si.
- 2 Dr. dr. Husnawati, S.Ked., M.Si.

Judul Skripsi : Analisis *In Silico* Inhibisi Molekuler Neuraminidase Influenza Dengan Senyawa Aktif Hasil Fermentasi Dari Campuran Madu Hutan Dan Bawang Putih  
Nama : Mohammad Thaariq Adlwa  
NIM : G8401221027

Disetujui oleh

Pembimbing 1:  
Ukhradiya Magharaniq Safira P., S.Si., M.Si.



Pembimbing 2:  
Prof. Dr. Ir. I Made Artika, M.App. Sc



Diketahui oleh:

Ketua Departemen Biokimia  
Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si., M.Si.  
NIP. 19770915 2005012002



Tanggal Ujian:  
5 Mei 2026

Tanggal Lulus:

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang  
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :  
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah  
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.  
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



### *@Hak cipta milik IPB University*

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

## PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas rahmat dan petunjuk-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan November 2025 sampai bulan Februari 2026 ini berjudul “Analisis *In Silico* Inhibisi Molekuler Neuraminidase Influenza Dengan Senyawa Aktif Hasil Fermentasi Dari Campuran Madu Hutan Dan Bawang Putih”.

Ucapan terima kasih sebesar-besarnya penulis ucapkan kepada Ukhradiya Magharaniq Safira P., S.Si., M.Si. selaku pembimbing I dan Prof. Dr. Ir. I Made Artika, M.App. Sc selaku pembimbing II yang telah membimbing dan memberi ilmu serta saran selama penelitian hingga penulisan. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada dosen penguji pada seminar proposal, seminar hasil, hingga sidang yang memberikan banyak masukan serta saran dalam rangka penyelesaian skripsi. Terima kasih juga disampaikan kepada staf Laboratorium Biokimia yang telah membantu penyediaan fasilitas dan bimbingan teknis selama penelitian berlangsung.

Ucapan terima kasih secara khusus penulis sampaikan kepada Mama (Ibu Dessy Ekowaty), Papa (Bapak Moh Safii), Uti (Ibu Sri Herawaty), dan Akung (Bapak Soekarto) yang senantiasa mendoakan dan memberikan dukungan tanpa henti untuk keberhasilan dan kelancaran penulis dalam menyelesaikan tugas akhir ini. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada teman-teman dekat penulis, Ical, Naura, Damar, Aszizah, Nompal, Risal, Ucen, dan Gipari yang telah membantu penulis dengan memberikan dukungan emosional selama pelaksanaan penelitian dan penulisan karya ilmiah, kepada teman-teman Dalaiks (Damar, Elramda, Evan, Gipari, Husayn, Ilham, Kevin, Nopal, Rafi, Rizal) yang telah membersamai dari awal masa perkuliahan, serta teman-teman Pestrek Bik 62 (Angel, Aszizah, Cipa, Damar, Kevin, Naila). Semoga karya ilmiah ini dapat bermanfaat bagi yang membutuhkan dan bagi perkembangan ilmu pengetahuan, khususnya bidang medis, dan kesehatan masyarakat pada umumnya.

Bogor, Februari 2026

*Mohammad Thaariq Adlwa*

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



### @Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
  - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
  - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

## DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	viii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Hipotesis	2
1.5 Manfaat	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Neuraminidase virus influenza	3
2.2 Bawang putih ( <i>Allium sativum</i> L.)	4
2.3 Madu	5
2.4 Fermentasi	6
2.5 <i>Liquid Chromatography-Mass Spectrometry</i> (LC-MS)	8
2.6 Studi <i>in silico</i>	9
III METODE	12
3.1 Waktu dan Tempat	12
3.2 Alat dan Bahan	12
3.3 Prosedur Penelitian	12
3.4 Analisis Data dan Visualisasi	16
IV HASIL	17
4.1 Fermentasi Madu Hutan dan Bawang Putih	17
4.2 Pembacaan LC-MS Terhadap Hasil Fermentasi	19
4.3 <i>Screening</i> Terhadap Parameter Farmakokinetik	19
4.4 Validasi <i>Grid Box</i> Terhadap Reseptor Neuraminidase	20
4.5 <i>Molecular Docking</i> Senyawa Aktif Terhadap Reseptor Neuraminidase	21
V PEMBAHASAN	27
5.1 Fermentasi Madu Hutan dan Bawang Putih	27
5.2 Pembacaan LC-MS Terhadap Hasil Fermentasi	28
5.3 <i>Screening</i> Terhadap Parameter Farmakokinetik	29
5.4 Validasi <i>Grid Box</i> Terhadap Reseptor Neuraminidase	31
5.5 <i>Molecular Docking</i> Senyawa Aktif Terhadap Reseptor Neuraminidase	32
VI SIMPULAN DAN SARAN	36
6.1 Simpulan	36
6.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	43
RIWAYAT HIDUP	58



## DAFTAR TABEL

1	Hasil pembacaan nilai pH dan persen total asam tertitrasi terhadap tiga tabung fermentasi madu hutan dan bawang putih	18
	Informasi prediksi LD <sub>50</sub> yang diperoleh menggunakan situs web ProTox 3.0 terhadap ligan uji	20
	Nilai <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) terhadap setiap ukuran <i>grid box</i> yang digunakan untuk proses <i>re-docking</i> dengan ligan ko-kristal	21
	Hasil <i>molecular docking</i> ligan uji dan ligan pembanding terhadap reseptor neuraminidase dengan kode akses PDB 5L18	22
	Residu yang terlibat dalam interaksi ligan dan reseptor 5L18	24

## DAFTAR GAMBAR

1	Ilustrasi aktivitas neuraminidase influenza	4
2	Struktur 3 dimensi dari monomer neuraminidase virus avian influenza N9	4
3	Umbi bawang putih	5
4	Jenis-jenis fermentasi berdasarkan produk yang dihasilkan	8
5	Diagram alur prinsip kerja LC-MS	9
6	Warna pada madu hutan dan bawang putih	18
7	Grafik kadar gas CO <sub>2</sub> pada hari ke-0, 7, 14, 21, dan 31	18
8	Kromatogram LC-MS	19
9	Visualisasi 2 dimensi	25
10	Visualisasi 3 dimensi	26
11	Struktur kimia katekin dan epikatekin	29

## DAFTAR LAMPIRAN

1	Bagan alir penelitian	44
2	Senyawa yang terdeteksi pada analisis LC-MS menggunakan energi rendah 4 Volt	45
3	Senyawa yang terdeteksi pada analisis LC-MS menggunakan energi tinggi 25–70 Volt	51
4	Screening senyawa hasil analisis LC-MS terhadap parameter Lipinski <i>Rules of 5</i>	53
5	Screening senyawa hasil analisis LC-MS terhadap parameter ADMET	54
6	Prediksi bioaktivitas terhadap virus influenza	60
7	Contoh perhitungan %TAT	60