

**POTENSI SENYAWA BIOAKTIF SURIAN (*Toona sinensis*)
SEBAGAI INHIBITOR 3-DEHIDROKUINAT DEHIDRATASE
Salmonella typhimurium SECARA *IN SILICO***

NAILA NUR FATIMAH ALKAF



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

- 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 “Potensi Senyawa Bioaktif Surian (*Toona sinensis*) sebagai Inhibitor 3-Dehidrokuinat Dehidratase *Salmonella typhimurium* secara *In Silico*” 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, Juni 2026

Naila Nur Fatimah Alkaf
G8401221071



ABSTRAK

NAILA NUR FATIMAH ALKAF. Potensi Senyawa Bioaktif Surian (*Toona sinensis*) sebagai Inhibitor 3-Dehidrokuinat Dehidratase *Salmonella typhimurium* secara *In Silico*. Dibimbing oleh SYAMSUL FALAH dan DIMAS ANDRIANTO.

Bakteri *Salmonella enterica* serotipe *typhimurium* merupakan salah satu patogen yang sering menyebabkan penyakit. Penggunaan antibiotik yang tidak teratur membuat bakteri *S. typhimurium* resisten terhadap antibiotik. Antibiotik dari bahan alam antibakterial seperti *Toona sinensis* diperlukan sebagai alternatif. Penelitian ini bertujuan menentukan senyawa bioaktif dari ekstrak *T. sinensis* yang memiliki potensi sebagai inhibitor protein penting pada *S. typhimurium*, yakni 3-dehidrokuinat dehidratase (DHQD). Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah *molecular docking* menggunakan ligan yang diperoleh dari literatur pada situs aktif enzim DHQD. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa senyawa γ -glutamil-(*cis*-S-1-propenil)-tioglisin yang diperoleh dari tunas *T. sinensis* merupakan senyawa terbaik yang dapat menghambat DHQD, dengan energi bebas pengikatan (ΔG_{ikatan}) sebesar -5.5740 kkal/mol. γ -Glutamil-(*cis*-S-1-propenil)-tioglisin berinteraksi dengan residu katalitik Lys170 dan His143, serta residu pengikatan Arg48, Ser232, Gln236, Phe225, Arg213, dan Arg82. γ -Glutamil-(*cis*-S-1-propenil)-tioglisin juga diprediksi memiliki bioavailabilitas dan toksisitas yang rendah sehingga aman bagi manusia. γ -Glutamil-(*cis*-S-1-propenil)-tioglisin dari *T. sinensis* berpotensi diaplikasikan sebagai inhibitor DHQD *S. typhimurium* untuk alternatif antibiotik.

Kata kunci: antibakteri, *molecular docking*, *Salmonella typhimurium*, *Toona sinensis*

ABSTRACT

NAILA NUR FATIMAH ALKAF. The Potential of Toon Tree (*Toona sinensis*) Bioactive Compounds as *Salmonella typhimurium* 3-Dehydroquinate Dehydratase Inhibitor by In Silico Screening. Supervised by SYAMSUL FALAH and DIMAS ANDRIANTO.

Salmonella enterica serotype *typhimurium* bacteria is a pathogen that frequently caused diseases. The use of antibiotics without proper regulation induced the development of antibiotics resistance in *S. typhimurium*. Antibiotics from natural antibacterial bioactive compounds like the ones from *Toona sinensis* are needed as an alternative. This research aims to determine the potential compound from *T. sinensis* extracts that could acts as important protein inhibitor in *S. typhimurium*, which is 3-dehydroquinate dehydratase (DHQD). The method used in this research is molecular docking, using the ligands obtained from various literature at the active site of DHQD enzyme. The molecular docking result showed that γ -glutamyl-(*cis*-S-1-propenyl)-thioglycine from *T. sinensis* shoots is the best ligand that could inhibit DHQD, with -5.5740 kcal/mol of binding energy (ΔG_{bind}). γ -Glutamyl-(*cis*-S-1-propenyl)-thioglycine interacted with the catalytic residues Lys170 and His143, as well as the binding residues Arg48, Ser232, Gln236, Phe225, Arg213, and Arg82. γ -Glutamyl-(*cis*-S-1-propenyl)-thioglycine is also predicted to have low bioavailability and toxicity so that it would be safe to use by human. γ -Glutamyl-(*cis*-S-1-propenyl)-thioglycine from *T. sinensis* has the potential to be applied as the inhibitor of *S. typhimurium* DHQD for antibiotics alternatives.

Keywords: antibacterial, molecular docking, *Salmonella typhimurium*, *Toona sinensis*



@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 2026 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.

**POTENSI SENYAWA BIOAKTIF SURIAN (*Toona sinensis*)
SEBAGAI INHIBITOR 3-DEHIDROKUINAT DEHIDRATASE
Salmonella typhimurium SECARA *IN SILICO***

NAILA NUR FATIMAH ALKAF

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. Ukhradiya Magharaniq Safira Purwanto, S.Si., M.Si.
2. Rini Kurniasih, S.Si., M.Si.



Judul Skripsi : Potensi Senyawa Bioaktif Surian (*Toona sinensis*) sebagai
Inhibitor 3-Dehidrokuinat Dehidratase *Salmonella typhimurium*
secara *In Silico*

Nama : Naila Nur Fatimah Alkaf
NIM : G8401221071

@Hak cipta milik IPB University

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Syamsul Falah, S.Hut., M.Si.
NIP. 197005032005011000

Pembimbing 2:
Dr. Dimas Andrianto, S.Si., M.Si.
NIP. 198311192009121003

Diketahui oleh

Ketua Departemen Biokimia:
Prof. Dr. Mega Safithri, M.Si.
NIP. 197709152005012002



Tanggal Ujian:
24 Juni 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 segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Oktober 2025 sampai bulan Januari 2026 ini ialah *drug discovery*, dengan judul “Potensi Senyawa Bioaktif Surian (*Toona sinensis*) sebagai Inhibitor 3-Dehidrokuinat Dehidratase *Salmonella typhimurium* secara *In Silico*”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr. Syamsul Falah, S.Hut., M.Si. dan Dr. Dimas Andrianto, S.Si., M.Si. yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing akademik, moderator seminar, dan penguji luar komisi pembimbing. Di samping itu, penghargaan penulis sampaikan kepada Departemen Biokimia IPB yang telah membantu selama pengumpulan data. Ungkapan terima kasih juga disampaikan kepada ayah saya Helmi Alkaf, ibu saya Indah Lusiani, serta seluruh keluarga yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya. Ungkapan terima kasih juga saya ucapkan kepada teman-teman saya Zahra, Arina, Arsanti, Zulfa, Sabrina, dan Ana yang telah memberi masukan serta dukungan dalam proses pengerjaan skripsi.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juni 2026

Naila Nur Fatimah Alkaf

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan 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	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Surian	3
2.2 Metabolit Sekunder Tumbuhan	4
2.3 Mekanisme Kerja Antibakteri	6
2.4 <i>Salmonella typhimurium</i>	7
2.5 Enzim 3-Dehidrokuinat Dehidratase <i>Salmonella typhimurium</i>	9
2.6 Inhibitor 3-Dehidrokuinat Dehidratase	11
2.7 <i>Molecular Docking</i>	12
III METODE	14
3.1 Waktu dan Tempat	14
3.2 Alat dan Bahan	14
3.3 Prosedur Kerja	14
IV HASIL	16
4.1 Metabolit Sekunder Surian	16
4.2 <i>Molecular Docking</i>	17
4.3 Prediksi Bioavailabilitas Ligan	20
4.4 Prediksi Toksisitas Ligan	22
4.5 Interaksi Molekuler Ligan dengan 3-Dehidrokuinat Dehidratase	23
V PEMBAHASAN	26
5.1 Metabolit Sekunder Surian	26
5.2 <i>Molecular Docking</i> dan Interaksi Senyawa Bioaktif dengan Enzim	27
5.3 Interaksi Molekuler Ligan dengan Enzim	28
5.4 Prediksi Bioavailabilitas	29
5.5 Prediksi Toksisitas	30
VI SIMPULAN DAN SARAN	32
6.1 Simpulan	32
6.2 Saran	32
DAFTAR PUSTAKA	33
LAMPIRAN	37
RIWAYAT HIDUP	64



DAFTAR TABEL

1	Hasil validasi <i>grid box</i> dengan ligan alami asam 3-dehidrokuinat	17
2	Daftar ligan <i>Toona sinensis</i> yang berinteraksi dengan protein target DHQD	19
3	Hasil prediksi bioavailabilitas ligan dari <i>Toona sinensis</i> terhadap tubuh manusia	20
4	Hasil prediksi toksisitas ligan dari <i>Toona sinensis</i> terhadap tubuh manusia	22

DAFTAR GAMBAR

1	<i>Toona sinensis</i> Roem. (A) Tanaman utuh <i>Toona sinensis</i> . (B) Daun dari <i>Toona sinensis</i>	3
2	Struktur kerangka utama triterpenoid tetrasiklik dari <i>Toona sinensis</i>	4
3	Jalur biosintesis metabolit sekunder pada tumbuhan	5
4	Empat kelompok utama dari metabolit sekunder	6
5	Mekanisme antibakterial dari metabolit sekunder tumbuhan	7
6	Jalur metabolik yang digunakan <i>Salmonella typhimurium</i> selama pertumbuhan dalam usus tikus uji	9
7	Jalur sikimat	10
8	Struktur kristal DHQD tipe I dari <i>Salmonella typhimurium</i>	10
9	Struktur senyawa (A) Naringin. (B) Hesperidin	11
10	<i>Workflow drug discovery</i> berbasis bahan alam menggunakan <i>molecular docking</i>	13
11	Persebaran ligan uji berdasarkan sumbernya pada <i>Toona sinensis</i>	16
12	Persebaran ligan uji berdasarkan golongan senyawanya	17
13	Hasil superpose ligan-ligan validasi <i>grid box</i> 4.00 Å	18
14	Visualisasi 2D (a) dan 3D (b) hasil <i>molecular docking</i> DHQD dengan substrat alami asam 3-dehidrokuinat	24
15	Visualisasi 2D (a) dan 3D (b) hasil <i>molecular docking</i> DHQD dengan γ -Glutamyl-(<i>cis</i> -S-1-propenil)-tioglisin	25

DAFTAR LAMPIRAN

1	Daftar Senyawa Bioaktif <i>Toona sinensis</i>	38
2	Alur Penelitian	43
3	Hasil Prediksi Lipinski	44
4	Struktur Ligan Uji	45