

DESAIN KOMPLEKS FUSI SNAKIN UNTUK STUDI KELAYAKAN OVEREKSPRESI PADA *Escherichia coli*

AKMAL MAULIDA SASMITA



**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 “Desain Kompleksi Fusi Snakin untuk Studi Kelayakan Overekspresi pada *Escherichia coli*” 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, 15 Juli 2026

Akmal Maulida Sasmita
NIM. G8401221052



@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

AKMAL MAULIDA SASMITA. Desain Kompleksi Fusi Snakin untuk Studi Kelayakan Overekspresi pada *Escherichia coli*. Dibimbing oleh POPI ASRI KURNIATIN dan INDA SETYAWATI.

Snakin merupakan peptida tanaman yang berpotensi dikembangkan sebagai agen antimikroba, tetapi produksi dengan ekspresi rekombinan masih terkendala oleh aktivitas antimikroba snakin yang bersifat toksik terhadap *Escherichia coli* (*E. coli*) sebagai sel inang. Penelitian ini bertujuan mendesain kompleks fusi snakin melalui pendekatan *tandem repeat* dan protein fusi untuk memperoleh model dengan stabilitas dan kelarutan lebih baik serta aksesibilitas sisi aktifnya tertutup. Metode ini dilakukan dengan memvariasikan protein fusi, *linker*, situs pemotongan protease, dan jumlah *repeat* snakin. Model dievaluasi berdasarkan *predicted Template Modeling score* (pTM), *predicted Local Distance Difference Test* (pLDDT), *Predicted Aligned Error* (PAE), indikator kelarutan, konservasi residu, daerah *pocket*, serta penambatan molekuler. Hasil penelitian menunjukkan, snakin asli memiliki stabilitas struktur yang baik dengan skor pTM 0,86. Model terbaik hasil modifikasi (*Maltose Binding Protein-Linker-TEV Protease-Snakin*) memiliki skor pTM 0,82 dan berhasil dalam mempertahankan kelarutan dengan skor muatan permukaan bersih sebesar -14,60. Hasil evaluasi situs aktif menunjukkan bahwa daerah aktif snakin pada model hasil modifikasi masih terekspos. Simpulan temuan ini menunjukkan hasil modifikasi berpotensi untuk tetap mempertahankan kelarutan, tetapi belum optimal dalam menutupi sisi aktif snakin.

Kata kunci: ekspresi rekombinan, *E. coli*, protein fusi, snakin, *tandem repeat*

ABSTRACT

AKMAL MAULIDA SASMITA. Design of Snakin Fusion Constructs for Feasibility Study of Overexpression in *Escherichia coli*. Supervised by POPI ASRI KURNIATIN and INDA SETYAWATI.

Snakin is a plant antimicrobial peptide with potential to be developed as an antimicrobial agent; however, its production through recombinant expression is still limited by low solubility and toxic effects on *E. coli* as the host cell. This study aimed to design snakin fusion constructs using tandem repeat and fusion protein approaches to obtain models with improved stability and solubility, as well as reduced accessibility of the active site. The designs were generated by varying the fusion protein, linker, protease cleavage site, and number of snakin repeats. The models were evaluated based on pTM, pLDDT, PAE, solubility indicators, residue conservation, pocket regions, and molecular docking. Native snakin showed good structural stability with a pTM score of 0.86. The best modified model, had a pTM score of 0.82 and successfully improved solubility, with a net charge of -14.60. Conservation, pocket, and molecular docking analyses showed that the active region of snakin in the modified model remained exposed and was still able to interact with ligands. These findings indicate that the modification has the potential to maintain solubility, but is not yet optimal in covering the active site of snakin.

Keywords: *E coli*, fusion protein, molecular docking, snakin, tandem repeat



@Hak cipta milik IPB University

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 2026¹
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.

**DESAIN KOMPLEKS FUSI SNAKIN UNTUK
STUDI KELAYAKAN OVEREKSPRESI
PADA *Escherichia coli***

AKMAL MAULIDA SASMITA

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

IPB University

IPB University
— Bogor Indonesia —



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. Prof. Dr. drh. Hasim, DEA.
2. Dr. Dimas Andrianto, S.Si., M.Si.

Perpustakaan IPB University



Judul Skripsi : Desain Kompleks Fusi Snakin untuk Studi Kelayakan Overekspresi
pada *Escherichia coli*

Nama : Akmal Maulida Sasmita
NIM : G8401221052

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Dr. Popi Asri Kurniatin, S.Si., Apt., M.Si.
NIP. 1976100120060420001

Pembimbing 2:

Dr. Inda Setyawati, S.T.P., M.Si.
NIP. 1984052420121220004

Diketahui Oleh

Ketua Departemen Biokimia

Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si., M.Si.
NIP. 197709152005012002

Tanggal Ujian:
15 Juli 2026

Tanggal lulus:



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

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.

Perpustakaan 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 dari bulan November 2025 sampai bulan Mei 2026 dengan judul “Desain Kompleks Fusi Snakin untuk Studi Kelayakan Overekspresi pada *Escherichia coli*”

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing Dr. Popi Asri Kurniatin, S.Si., Apt., M. Si. selaku pembimbing pertama dan Dr. Inda Setyawati S.T.P., M.Si sebagai pembimbing kedua yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing akademik, moderator seminar. Ungkapan terima kasih penulis sampaikan kepada Bapak Suryasmita dan Ibu Neng Ratna Ningsih, serta seluruh keluarga yang telah memberikan dukungan, doa, material dan kasih sayangnya.

Penulis sampaikan terimakasih juga kepada Kayla Rizky Amalia Putri yang telah menjadi bagian dari proses pengembangan diri penulis, dan selalu memberikan dukungan, serta menjadi tempat berbagi cerita dalam proses perkuliahan hingga penyusunan skripsi ini. Ucapan terimakasih juga penulis sampaikan kepada tim PKM Pionir Asa, Aditya Tibigis, Hanzeo Nur Aziza, dan Ilongna Muhessa yang selalu memberikan keceriaan. Ucapan terimakasih juga kepada teman-teman Rani Andriani, Annisa Fauziyah, Acep Azriel, Yujli Mutavin, Ikram Maulana, Najmi Maulidia, Yasmin Nuraeni, Reza Novandra, dan seluruh civitas Biokimia yang selalu memberikan dukungan dan membantu penulis dalam menyelesaikan skripsi ini. Ucapan terimakasih juga penulis sampaikan kepada tim Badminton, segenap jajaran Departemen Biokimia dan kepada seluruh pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu, yang telah memberikan bantuan, dukungan, doa, dan semangat selama proses perkuliahan hingga penyusunan skripsi ini. Semoga segala kebaikan yang telah diberikan mendapatkan balasan terbaik dari Allah SWT.

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

Bogor, 15 Juli 2026

Akmal Maulida Sasmita



@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	iii
DAFTAR GAMBAR	iii
DAFTAR LAMPIRAN	iii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Hipotesis	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Peptida Anti Mikroba	3
2.2 Mekanisme Kerja Peptida Antimikroba	5
2.3 Peptida Anti Mikroba Snakin	6
2.3.1 Struktur Snakin	7
2.3.2 Aktivitas Biologis Snakin	8
2.3.3 Ekspresi Snakin secara rekombinan	8
2.4 Over Ekspresi pada <i>Escherichia coli</i>	9
2.5 Desain Kompleks Protein Fusi	12
2.6 Desain Kompleks Fusi <i>Tandem Repeat</i>	12
2.7 AlphaFold3	13
III METODE	15
3.1 Waktu dan Tempat	15
3.2 Alat dan Bahan	15
3.3 Prosedur Kerja	15
3.3.1 Preparasi <i>file</i> dan data snakin	15
3.3.2 Pemilihan <i>linker</i> , protein fusi, dan situs pemotongan	15
3.3.3 Prediksi struktur protein dengan AlphaFold3	16
3.3.4 Validasi kelarutan	16
3.3.5 Analisis daerah sisi aktif	17
3.3.6 Penambatan Molekuler	17
3.3.7 Visualisasi Struktur dengan PyMOL	18
IV HASIL	19
4.1 Model Terbaik Kompleks Fusi Snakin	19
4.2 Karakter Fisikokimia Snakin dan Model Kompleks Fusi	21
4.3 Hasil Evaluasi Situs Aktif Snakin dari Model Fusi Terbaik	22
4.4 Prediksi Afinitas Ligan Fosfolipid terhadap Kompleks Fusi Terbaik	23
V PEMBAHASAN	25
VI SIMPULAN DAN SARAN	31
6.1 Simpulan	31
6.2 Saran	31
DAFTAR PUSTAKA	32
LAMPIRAN	39



DAFTAR TABEL

1 Model terbaik desain kompleks fusi snakin berdasarkan skor pTM	19
2 Hasil validasi fisikokimia snakin dan model kompleks fusi terbaik	22
3 Perbandingan ΔG ligan terhadap struktur snakin dan model terbaik	23

DAFTAR GAMBAR

1 Klasifikasi peptida antimikroba	4
2 Struktur tiga dimensi AMP tanaman	4
3 Struktur umum peptida antimikroba (AMP)	5
4 Berbagai jenis model AMP pada membran dalam membunuh bakteri	6
5 Distribusi AMP diberbagai famili tanaman	7
6 Struktur 3D L-snakin-1 (hijau) dan D-snakin-1 (oren)	8
7 Struktur umum selubung sel <i>E. coli</i>	10
8 Skema kerja AlphaFold3 dalam prediksi struktur protein	14
9 Grafik <i>heatmap</i> PAE hasil prediksi AlphaFold3	20
10 Visualisasi struktur tiga hasil prediksi menggunakan AlphaFold3	21
11 Daerah konservasi dan <i>pocket</i>	23
12 Visualisasi hasil penambatan molekuler	24

DAFTAR LAMPIRAN

1 Bagan Alir Penelitian	41
2 Variasi Desain Kompleks Snakin	42
3 Visualisasi model terbaik menggunakan AlphaFold3	52