

SKRINING SENYAWA ANTIMIKROB *Parmotrema tinctorum* DARI LOKASI TERCEMAR LOGAM BERAT SECARA *IN VITRO* DAN *IN SILICO*

WAHYU AJI MAHARDHIKA



PROGRAM STUDI MIKROBIOLOGI
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025



@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 TESIS DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa tesis dengan judul “Skrining Senyawa Antimikrob *Parmotrema tinctorum* dari Lokasi Tercemar Logam Berat secara *In Vitro* dan *In Silico*” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apapun kepada perguruan tinggi manapun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan oleh penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam daftar Pustaka di bagian akhir tesis ini.

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

Bogor, Juli 2025

Wahyu Aji Mahardhika
G3501211012



RINGKASAN

WAHYU AJI MAHARDHIKA. Skrining Senyawa Antimikrob *Parmotrema tinctorum* dari Lokasi Tercemar Logam Berat secara *In Vitro* dan *In Silico*. Dibimbing oleh LISDAR A MANAF dan SETYANTO TRI WAHYUDI.

Parmotrema tinctorum merupakan liken bertipe foliose yang dapat digunakan sebagai sumber senyawa bioaktif dan bioindikator polutan. Liken tersebut dapat hidup di daerah yang memiliki polutan yang tinggi, salah satunya Pb (Timbal). Penelitian terkait hubungan antara konsentrasi timbal dengan aktivitas senyawa antimikrob dari talus terhadap *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis*, *Propionibacterium acne*, *Staphylococcus epidermidis*, dan cendawan uniseluler *Candida albicans*, *C. tropicalis*, *R. mucilaginosa* belum pernah dilakukan hingga saat ini.

Penelitian ini diawali dengan pengambilan sampel dan analisis kandungan Pb talus *P. tinctorum* dari kebun buah Mekarsari, Cileungsi, Bogor yang diambil dari tiga zona (MZ1, MZ2, MZ3) yang terpapar Pb. Sampel koleksi hutan mangrove di Pantai Batu Bedhil, Belitung (MBB) digunakan sebagai kontrol. Talus kemudian dikeringkan dan diekstraksi dengan metanol dan diuji aktivitasnya terhadap mikrob uji. Selanjutnya dikonfirmasi hubungan timbal dengan aktivitas ekstrak kasar yang diencerkan secara bertingkat hingga 10^4 terhadap *P. acne*. Ekstrak kasar kemudian dideteksi aktivitas senyawa antimikrobnya dengan TLC-bioautografi lalu dilanjutkan dengan purifikasi parsial dengan TLC-preparatif. Fraksi preparatif kemudian diuji terhadap *B. subtilis* dan *P. acne*. Fraksi preparatif kemudian dianalisis struktur molekulnya dengan menggunakan LC-MS/MS. Selanjutnya dilakukan identifikasi mekanisme kerja molekul hasil LC-MS/MS melalui *docking* molekuler secara *in silico* dengan melihat interaksi antar molekul terhadap beberapa protein target *P. acne*.

Kandungan Pb tertinggi terdapat pada MZ3 dengan 15,64 ppm, diikuti oleh MZ2 14,72 ppm, MZ1 12,86 ppm, dan MBB 3,42 ppm. Ekstrak kasar dapat menghambat seluruh mikrob uji dan aktivitas terhadap *P. acne* memiliki hasil yang berbeda nyata dibanding aktivitas terhadap mikrob yang lain. Uji ekstrak hasil pengenceran hingga 10^4 terhadap *P. acne* didapatkan ekstrak MZ3 masih menghasilkan zona bening sedangkan ekstrak zona lain tidak terdapat aktivitas. Hasil TLC-Bioautografi didapatkan ekstrak kasar MZ3 memiliki Rf 0,52-0,81 dan MBB memiliki Rf 0,68-0,91. Ekstrak fraksi TLC preparatif menunjukkan adanya penurunan aktivitas. Analisis menggunakan LC-MS/MS didapatkan senyawa sebanyak 58 dari MZ3 dan 50 dari MBB. Berdasarkan hasil *docking* molekuler hasil LC-MS/MS, didapatkan 24 senyawa terbaik yang memiliki energi ikatan tertinggi dengan tujuh protein *P. acne*. Berdasarkan pustaka, senyawa 4-[[2-[4-[[6,7-dihydroxy-3-(7-hydroxy-2-methyl-4,8-dioxo-1H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-3-yl)-4-oxochromene-5-carbonyl]oxymethyl] triazol-1-yl]acetyl]amino]butanoic acid yang berasal dari MZ3 belum diketahui aktivitas antimikrobnya tetapi memiliki energi afinitas yang paling baik terhadap semua protein target dan senyawa *propanoic acid* dan *Urolithin B 3-O-glucuronide* yang berasal dari MBB memiliki energi afinitas terbaik terhadap 6 protein target *P. acne*.

Kata Kunci: antimikrob, *in silico*, LC-MS/MS, *Parmotrema tinctorum*, TLC-bioautografi

SUMMARY

WAHYU AJI MAHARDHIKA. Screening of Antimicrobial Compounds from *Parmotrema tinctorum* Collected from Heavy Metal-Contaminated Sites through In Vitro and In Silico Approaches. Supervised by LISDAR A MANAF and SETYANTO TRI WAHYUDI.

Parmotrema tinctorum is a foliose lichen that can be sources of bioactive compounds and as a bioindicator of pollutants. This lichen can survive in areas with high levels of pollutants, including lead (Pb). To date, no studies have been conducted on the relationship between lead concentrations in the lichen thalli and the antimicrobial activities against *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis*, *Propionibacterium acnes*, *Staphylococcus epidermidis*, and the unicellular fungi *Candida albicans*, *C. tropicalis*, and *R. mucilaginosa*.

This study began with sampling and analysis of Pb contents in *P. tinctorum* thalli collected from the Mekarsari Fruit Garden, Cileungsi, Bogor, from three zones (MZ1, MZ2, MZ3) exposed to lead. Samples from a mangrove forest collection at Batu Bedhil Beach, Belitung (MBB), were used as control. The thalli were dried, extracted with metanol, and tested for antimicrobial activities. The relationship between lead contents and the activity of serially diluted crude extracts (up to 10⁴ times) against *P. acnes* was then examined. Antimicrobial compounds in the crude extracts were detected using TLC-bioautography and partially purified using preparative TLC. The TLC preparative fractions were then tested against *B. subtilis* and *P. acnes*. Molecular structure analysis of the TLC preparative fractions was performed using LC-MS/MS, followed by identification of antimicrobial mechanism action through interactions with seven *P. acnes* protein targets by in silico.

The highest Pb content was found in MZ3 at 15.64 ppm, followed by MZ2 at 14.72 ppm, MZ1 at 12.86 ppm, and MBB at 3.42 ppm. The crude extracts inhibited all tested microbes, and the activity against *P. acnes* was the highest, differed significantly from that against other microbes. Only MZ3 crude extract still showed a clear inhibition zone against *P. acnes* at 10⁴ dilution, while others did not. TLC-bioautography with *B. subtilis* showed that the MZ3 crude extract had R_f values of 0.52–0.81 and MBB had R_f values of 0.68–0.91. The TLC preparative extract fractions showed reduced activity against *B. subtilis* and *P. acne*. LC-MS/MS analysis identified 58 compounds from MZ3 and 50 from MBB. Based on molecular docking results, 24 compounds exhibited strong binding affinity with seven *P. acnes* protein targets. Based on the literatures, the compound 4-[[2-[4-[[6,7-dihydroxy-3-(7-hydroxy-2-methyl-4,8-dioxo-1H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-3-yl)-4-oxochromene-5-carbonyl] oxymethyl]triazol-1-yl]acetyl]amino]butanoic acid derived from MZ3 has not been yet identified for its antimicrobial activity, but it exhibits the best binding affinity energy toward all target proteins. Meanwhile, the compounds propanoic acid and urolithin B 3-O-glucuronide derived from MBB show antimicrobial activity and best binding affinity energy against six *P. acnes* protein targets.

Keywords: antimicrobial, in silico, LC-MS/MS, *Parmotrema tinctorum*, TLC-bioautography



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 2025
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 mengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB

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

SKRINING SENYAWA ANTIMIKROB *Parmotrema tinctorum* DARI LOKASI TERCEMAR LOGAM BERAT SECARA *IN VITRO* DAN *IN SILICO*

WAHYU AJI MAHARDHIKA

Tesis

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Magister pada
Program Studi Mikrobiologi

**PROGRAM STUDI MIKROBIOLOGI
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@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.

Penguji Luar Komisi Pembimbing pada Ujian Tesis:
Prof. Dr. Dra. Eti Rohaeti, M. S.



Judul Tesis : Skrining Senyawa Antimikrob *Parmotrema tinctorum* dari Lokasi
Tercemar Logam Berat secara *In Vitro* dan *In Silico*
Nama : Wahyu Aji Mahardhika
NIM : G3501211012

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Prof. Dr. Ir. Lisdar A. Manaf



Pembimbing 2:
Dr. Setyanto Tri Wahyudi, S.Si, M.Si



Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Prof. Dr. Dra. Anja Meryandini, M.S.
NIP 196203271987032001



Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Dr. Berry Juliandi S.Si., M.Si.
NIP 197807232007011001



Tanggal Ujian: 9 Juli 2025

Tanggal Lulus:



@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. Topik yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak Agustus 2022 sampai dengan Maret 2025 adalah “Skrining Senyawa Antimikrob *Parmotrema tinctorum* dari Lokasi Tercemar Logam Berat secara *In Vitro dan In Silico*”

Terima kasih penulis ucapkan kepada pembimbing Prof. Dr. Ir. Lisdar A. Manaf dan Dr. Setyanto Tri Wahyudi, S.Si, M.Si. yang telah membimbing dan banyak memberi saran kepada penulis. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada dosen seminar Dr. drh. Anita Esfandiari, M.Si., penguji luar komisi pembimbing Prof. Dr. Dra. Eti Rohaeti, M.S. dan Kaprodi Mikrobiologi Prof. Dr. Dra. Anja Meryandini, M.S. Penulis juga mengucapkan terima kasih dan penghargaan terhadap seluruh staf dan anggota Kebun Buah Mekarasari, Cileungsi, Bogor, Laboratorium Sumberdaya Hayati Jamur Biotech Center IPB, Laboratorium Mikologi Biologi FMIPA IPB, Laboratorium Terpadu Biologi FMIPA IPB, IPB *Culture Collection*, dan Laboratorium Riset Unggulan IPB yang telah membantu selama pengumpulan data. Ungkapan terima kasih juga saya sampaikan kepada Ayah, Ibu, dan seluruh keluarga, dosen, laboran, sahabat, dan teman seperjuangan di Prodi Mikrobiologi 2021, Mikrobiologi, Biologi dan Bioteknologi UNDIP, Biologi IPB, yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya kepada penulis.

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

Bogor, Juli 2025

Wahyu Aji Mahardhika

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

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



DAFTAR ISI

RINGKASAN.....	iii
SUMMARY.....	iv
PRAKATA.....	ix
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR GAMBAR.....	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
II PENDAHULUAN	1
2.1 Latar Belakang.....	1
2.2 Rumusan Masalah	2
2.3 Tujuan.....	2
2.4 Manfaat.....	3
2.5 Kebaruan	3
III TINJAUAN PUSTAKA	4
3.1 Liken <i>Parmotrema tinctorum</i>	4
3.2 Mikrob Patogen	5
3.2.1 <i>Escherichia coli</i>	5
3.2.2 <i>Propionibacterium acne</i>	6
3.2.3 <i>Staphylococcus epidermidis</i>	7
3.2.4 <i>Bacillus subtilis</i>	7
3.3 Cendawan Patogen	7
3.3.1 <i>Candida albicans</i>	7
3.3.2 <i>Candida tropicalis</i>	8
3.3.3 <i>Rhodotorula mucilaginosa</i>	8
3.4 Metode Kombinasi <i>In Vitro</i> dan <i>In Silico</i>	9
3.5 Sumber Database	9
3.5.1 PubChem	9
3.5.2 Protein Data Bank (PDB)	10
3.6 Timbal (Pb)	10
3.7 <i>Liquid Chromatography- Mass Spectroscopy</i>	10
3.8 Antimikrob	10
IV METODE	12
4.1 Waktu dan Tempat	12
4.2 Kerangka Penelitian	12
4.3 Alat dan Bahan	13
4.4 Prosedur Kerja	13
4.4.1 Pengambilan sampel <i>P. tinctorum</i>	13
4.4.2 Ekstraksi senyawa bioaktif	13
4.4.3 Analisis kandungan timbal	13
4.4.4 Uji aktivitas antimikrob	14

4.4.5	Aktivitas antimikrob berdasarkan pengenceran ekstrak.....	14
4.4.6	Deteksi senyawa antimikrob menggunakan TLC-bioautografi.....	15
4.4.7	Purifikasi parsial fraksi preparatif senyawa antimikrob	15
4.4.8	Deteksi absorbansi maksimum senyawa	16
4.4.9	Pengujian aktivitas antibakteri fraksi TLC preparatif	16
4.4.10	Analisis senyawa menggunakan LC-MS/MS.....	16
4.4.11	Preparasi ligan untuk pengujian secara <i>in silico</i>	17
4.4.12	Preparasi protein target <i>P. acne</i> untuk pengujian secara <i>in silico</i>	17
4.4.13	Docking molekuler melalui <i>in silico</i>	17

IV HASIL DAN PEMBAHASAN 18

4.1	Karakterisasi <i>Parmotrema tinctorum</i>	18
4.2	Karakterisasi Mikrob Uji	19
4.3	Analisis kandungan Pb pada talus	19
4.4	Skrining Aktivitas Antimikrob Ekstrak Kasar <i>P. tinctorum</i>	20
4.5	Aktivitas Antimikrob Berdasarkan Pengenceran Ekstrak	22
4.6	Deteksi Senyawa Antimikrob melalui TLC-Bioautografi.....	22
4.7	Aktivitas Antibakteri Ekstrak Kasar dan Fraksi Preparatif	23
4.8	Deteksi Pola Absorbansi Ekstrak	24
4.9	Senyawa Fraksi TLC Preparatif <i>P. tinctorum</i> dengan LC-MS/MS.....	26
4.10	<i>Docking</i> Molekuler melalui <i>In Silico</i>	31
4.10.1	Protein ADEK	32
4.10.2	Protein dITP.....	37
4.10.3	Protein IlvC	42
4.10.4	Protein murQ	47
4.10.5	Protein MutM	52
4.10.6	Protein HylB.....	57
4.10.7	Protein tgt	62
4.10.8	Senyawa <i>P. tinctorum</i> sebagai protein multitarget.....	67

V SIMPULAN DAN SARAN 69

5.1	Simpulan	69
5.2	Saran	69

DAFTAR PUSTAKA70

LAMPIRAN79

RIWAYAT HIDUP104

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 mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



DAFTAR TABEL

1	Analisis kandungan timbal (Pb) pada talus <i>P. tinctorum</i>	19
2	Aktivitas antimikrob ekstrak kasar talus <i>P. tinctorum</i> terhadap beberapa mikrob patogen	20
3	Uji aktivitas antibakteri <i>P. tinctorum</i> terhadap <i>P. acne</i> berdasarkan pengenceran ekstrak	21
4	Aktivitas antibakteri ekstrak kasar dan fraksi preparative	24
5	Senyawa yang terkandung dalam fraksi TLC preparatif dari lokasi MZ3 dan MBB. Warna hijau menunjukkan keberadaan senyawa dari fraksi TLC preparatif pada kedua lokasi tersebut.	27
6	Protein reseptor pada <i>P. acne</i> yang diperoleh dari <i>website</i> Uniprot	32
7	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein ADEK	33
8	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein ITP	38
9	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein ilvC	43
10	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein murQ	48
11	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein mutM	53
12	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein HylB	58
13	Peringkat 10 besar senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein tgt	63
14	Total Interaksi 24 Senyawa <i>P. tinctorum</i> terpilih terhadap beberapa target protein reseptor <i>P. acne</i>	67

DAFTAR GAMBAR

1	Talus liken <i>P. tinctorum</i>	4
2	Skema kerangka penelitian	18
3	Morfologi <i>P. tinctorum</i>	19
4	Morfologi mikrob uji	20
5	Perbedaan warna ekstrak talus liken <i>P. tinctorum</i>	21
6	Aktivitas antimikrob ekstrak kasar <i>P. tinctorum</i> terhadap mikrob patogen berdasarkan zona hambat.	23
7	Deteksi senyawa antimikrob ekstrak <i>P. tinctorum</i> terhadap <i>B. subtilis</i>	25
8	Pola absorbansi ekstrak kasar dan fraksi preparatif <i>P. tinctorum</i>	26
9	Pola kromatogram fraksi preparatif <i>P. tinctorum</i>	31
10	Kelompok senyawa yang terkandung dalam fraksi TLC preparatif dari lokasi (A) MZ3 dan (B) MBB.	33
11	Visualisasi protein ADEK menggunakan SWISS-MODEL	34
12	Energi afinitas 88 senyawa dari <i>P. tinctorum</i> terhadap protein ADEK yang diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 (peringkat dicantumkan pada bagian depan kode CID molekul) terhadap protein ADEK yaitu CID_145767539, CID_44348376, CID_101495881, CID_99613,	35

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 mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

- CID_11526038, CID_124319, CID_14717800, CID_442813, CID_5273284, CID_65130.
- 13 Sepuluh senyawa terpilih (warna ungu ●■■■, CID_145767539, 38
CID_44348376, CID_101495881, CID_99613, CID_11526038,
CID_124319, CID_14717800, CID_442813, CID_5273284,
CID_65130) berinteraksi dengan protein ADEK pada sisi aktif yang
terdiri dari residu asam amino (warna hijau dan kuning ●■■■, panah)
melalui ikatan hidrogen (warna hijau, ----) dan asam amino hidrofobik
(warna merah, panah).
 - 14 Visualisasi protein dITP menggunakan SWISS-MODEL 39
 - 15 Energi afinitas 88 senyawa *P. tinctorum* terhadap protein dITP yang 40
diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan
nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 terhadap protein dITP
(CID_145767539, CID_44348376, CID_101495881, CID_99613,
CID_11526038, CID_124319, CID_14717800, CID_442813,
CID_5273284, CID_65130).
 - 16 Sepuluh senyawa terpilih (warna ungu, CID_145767539, 42
CID_44348376, CID_14717800, CID_443076, CID_5315685,
CID_2868458, CID_10906957, CID_124319, CID_11526038,
CID_161532) (warna hitam ungu) berinteraksi dengan protein dITP
dari residu asam amino melalui ikatan hidrogen (warna hijau) dan
asam amino hidrofobik (warna merah).
 - 17 Visualisasi protein ilvC menggunakan SWISS-MODEL 43
 - 18 Energi afinitas 88 senyawa *P. tinctorum* terhadap protein ilvC yang 44
diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan
nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 terhadap protein ilvC
(CID_145767539, CID_44348376, CID_5273284, CID_10906957,
CID_14717800, CID_101495881, CID_443076, CID_124319,
CID_5339787, CID_53320491).
 - 19 Sepuluh senyawa terpilih (warna hitam ungu, CID_145767539, 46
CID_44348376, CID_5273284, CID_10906957, CID_14717800,
CID_101495881, CID_443076, CID_124319, CID_5339787,
CID_53320491) berinteraksi dengan protein ilvC dari residu asam
amino melalui ikatan hidrogen (warna hijau) dan asam amino
hidrofobik (warna merah).
 - 20 Visualisasi protein murQ menggunakan SWISS-MODEL 47
 - 21 Energi afinitas 88 senyawa *P. tinctorum* terhadap protein murQ yang 48
diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan
nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 terhadap protein murQ
(CID_161532, CID_5315685, CID_101495881, CID_145767539,
CID_14717800, CID_122203641, CID_443076, CID_11526038,
CID_21589805, CID_442813).
 - 22 Sepuluh senyawa terpilih (CID_161532, CID_5315685, 50
CID_101495881, CID_145767539, CID_14717800,
CID_122203641, CID_443076, CID_11526038, CID_21589805,
CID_442813) berinteraksi dengan protein murQ dari residu asam
amino melalui ikatan hidrogen (warna hijau) dan asam amino
hidrofobik (warna merah).

23	Visualisasi protein mutM menggunakan SWISS-MODEL	53
24	Energi afinitas 88 senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein mutM yang diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 terhadap protein mutM (CID_10906957, CID_161532, CID_15446454, CID_122203641, CID_145767539, CID_101495881, CID_44348376, CID_53320491, CID_560727, CID_5646).	54
25	Sepuluh senyawa terpilih (warna hitam ungu, CID_10906957, CID_161532, CID_15446454, CID_122203641, CID_145767539, CID_101495881, CID_44348376, CID_53320491, CID_560727, CID_5646) berinteraksi dengan protein mutM dari residu asam amino melalui ikatan hidrogen (warna hijau) dan asam amino hidrofobik (warna merah).	55
26	Visualisasi protein hylB menggunakan SWISS-MODEL	58
27	Energi afinitas 88 senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein HylB yang diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 terhadap protein HylB (CID_145767539, CID_10906957, CID_101495881, CID_5315685, CID_442813, CID_44348376, CID_443076, CID_5273284, CID_14717800, CID_560727).	59
28	Sepuluh senyawa terpilih (warna hitam ungu, CID_145767539, CID_10906957, CID_101495881, CID_5315685, CID_442813, CID_44348376, CID_443076, CID_5273284, CID_14717800, CID_560727) berinteraksi dengan protein HylB dari residu asam amino melalui ikatan hidrogen (warna hijau) dan asam amino hidrofobik (warna merah).	60
29	Visualisasi protein TGT menggunakan SWISS-MODEL	63
30	Energi afinitas 88 senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein mutM yang diperingkat berdasarkan docking. Sepuluh senyawa terpilih dengan nilai afinitas tertinggi peringkat 1-10 terhadap protein murQ (CID_10906957, CID_161532, CID_15446454, CID_122203641, CID_145767539, CID_101495881, CID_44348376, CID_53320491, CID_560727, CID_5646).	64
31	Sepuluh senyawa terpilih (warna hitam ungu, CID_145767539, CID_44348376, CID_14717800, CID_443076, CID_5315685, CID_2868458, CID_10906957, CID_124319, CID_11526038, CID_161532) (warna hitam ungu) berinteraksi dengan protein tgt dari residu asam amino melalui ikatan hidrogen (warna hijau) dan asam amino hidrofobik (warna merah).	65

DAFTAR LAMPIRAN

1	Identitas metabolit <i>P. tinctorum</i> pada fraksi TLC preparatif MZ3 (Pubchem)	79
2	Identitas metabolit <i>P. tinctorum</i> pada fraksi TLC preparatif MBB (PubChem)	81
3	Kode CID senyawa pada <i>P. tinctorum</i> fraksi TLC preparatif MZ3	85
4	Kode CID senyawa pada <i>P. tinctorum</i> fraksi TLC preparatif MBB	86
5	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein ADEK	88
6	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein dITP	99
7	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein IlvC	92
8	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein MurQ	94
9	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein MutM	96
10	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein HylB	98
11	<i>Binding affinity</i> seluruh senyawa <i>P. tinctorum</i> terhadap protein tgt	100