

ABSTRAK

WINDA DEWI LESTARI. 2023. **ANALISIS MOLECULAR DOCKING POTENSI ANTIBIOTIK PADA DAUN BINAHONG (*Anredera cordifolia*) TERHADAP BAKTERI *Propionibacterium acnes* SEBAGAI SUMBER BELAJAR BIOLOGI MATERI BAKTERI.** Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Daun binahong di klaim oleh masyarakat lokal sebagai terapi non-farmakologis *acne vulgaris* yang dapat menghambat pertumbuhan bakteri yang menimbulkan jerawat (*acne vulgaris*). Penelitian ini adalah penelitian kualitatif dengan pendekatan studi kasus yang dirancang untuk mengetahui bagaimana potensi antibiotik dalam daun binahong terhadap bakteri penyebab jerawat yaitu *propionibacterium acnes*. Teknik pengumpulan data pada penelitian ini yaitu dengan uji GC-MS untuk mengetahui kandungan senyawa daun binahong dan prediksi senyawa bioaktif dengan penambatan senyawa uji dengan reseptor protein menggunakan metode *molecular docking*. Database dan software yang digunakan yaitu database molekul PubChem, database PDB, optimasi Avogadro, notepad, serta software penambatan AutoDock Tools, AutoDockVina, dan Discovery Studio. Berdasarkan hasil penambatan senyawa uji dengan reseptor secara keseluruhan menunjukkan adanya interaksi ikatan hidrofobik dan ikatan hidrogen. Senyawa uji yang memiliki potensi yang lebih besar yaitu senyawa 5-methyl-2-(1H-pyrrol-1-yl)phenol dengan ikatan hidrofobik sebanyak 4 macam ikatan yaitu ikatan van der Waals sebanyak 6 asam amino, ikatan Pi-Sigma sebanyak 2 asam amino dan ikatan Alkyl yang juga merupakan ikatan Pi-Alkyl 3 asam amino. Senyawa yang diketahui pada hasil GC-MS yang merupakan ion fragmen dari flavonoid yaitu phytol. dengan jumlah *rel.area(%)* atau kelimpahan senyawa sebanyak 46.02 dengan LD50 mg/kg dengan golongan *class toxic* 5. Adapun nilai *GI absorption* yang merupakan daya serap pada pencernaan dengan kemampuan serap rendah (*low*) dan Log K_p (*skin permeation*) dengan nilai -2.29 cm/s. Hal ini bisa dikatakan bahwa kandungan senyawa daun binahong berpotensi sebagai antibiotik khususnya antibakteri bagi jerawat yang masuk pada golongan antibiotik topikal.

Kata Kunci: *Anredera cordifolia* ; antibiotic; GC-MS; molecular docking

ABSTRACT

WINDA DEWI LESTARI. 2023. ANALYSIS OF MOLECULAR DOCKING ANTIBIOTIC POTENTIALS IN BINAHONG LEAF (*Anredera cordifolia*) AGAINST *Propionibacterium acnes* BACTERIA AS A SOURCE OF LEARNING IN BACTERIAL BIOLOGY. Department of Biology Education, Faculty of Teacher Training and Education, Siliwangi University, Tasikmalaya.

Binahong leaves are claimed by the local community as a non-pharmacological treatment for *acne vulgaris* which can inhibit the growth of bacteria that cause acne (*acne vulgaris*). This research is a qualitative research with a case study approach designed to find out how the potential of antibiotics in binahong leaves is against the bacteria that causes acne, namely *Propionibacterium acnes*. The data collection technique in this study was the GC-MS test to determine the content of binahong leaf compounds and the prediction of bioactive compounds by docking the test compounds with protein receptors using the molecular docking method. The databases and software used are the PubChem molecular database, PDB database, Avogadro optimization, notepad, and the AutoDock Tools, AutoDockVina, and Discovery Studio tethering software. Based on the results of the docking of the test compound with the receptor as a whole, it shows the interaction of hydrophobic bonds and hydrogen bonds. The test compound that has greater potential is 5-methyl-2-(1H-pyrrol-1-yl)phenol with 4 types of hydrophobic bonds, namely van der Waals bonds of 6 amino acids, Pi-Sigma bonds of 2 acids. amino and Alkyl bonds which are also Pi-Alkyl bonds of 3 amino acids. Compounds known in the GC-MS results are fragment ions of flavonoids, namely phytol. with the number of rel.area (%) or the abundance of the compound as much as 46.02 with an LD50 mg/kg with class toxic 5. The GI absorption value which is absorption in digestion with low absorption ability (low) and Log KP (skin permeation) with a value -2.29cm/s. This can be said that the content of binahong leaf compounds has the potential as an antibiotic, especially antibacterial for acne which is included in the topical antibiotic class.

Kata Kunci: *Anredera cordifolia* ; antibiotic;GC-MS; molecular docking