



Artikel Review: “Molecular Docking Berbagai Jenis Tanaman Sebagai Antibakteri terhadap Target Enzim Dna Gyrase”

Saeful Amin

Universitas Bakti Tunas Husada

Adilla Nurafdilla Solihah

Universitas Bakti Tunas Husada

Alamat : Jl. Letjen Mashudi No. 20, 46115, Tasikmalaya, Indonesia.

Email : nurafdillasolihahadilla@gmail.com

Abstract: Antibiotic resistance is a serious health problem as it reduces the effectiveness of therapy in treating bacterial infections. Therefore, the search for new antibacterial agents from natural products is essential. One widely used approach is molecular docking, which can predict interactions between plant bioactive compounds and bacterial target proteins quickly, efficiently, and at low cost. This review article summarizes recent studies on the antibacterial potential of various plants such as moringa (*Moringa oleifera*), white turmeric (*Curcuma zedoaria*), garlic (*Allium sativum*), ginger (*Zingiber officinale*), bitter ginger (*Zingiber aromaticum*), roselle (*Hibiscus sabdariffa L.*), lime (*Citrus aurantiifolia*), cat's whiskers (*Orthosiphon stamineus Benth*), sea hibiscus (*Hibiscus tiliaceus*), and mangrove (*Rhizophora stylosa*). Bioactive compounds such as quercetin, curcumenol, germacrone, alliin, gingerol, and zerumbone have been reported to show strong binding affinity toward essential bacterial proteins, including DNA gyrase, MurE, and PBP2. Some compounds even demonstrated binding values comparable to or better than standard antibiotics. Thus, molecular docking using software such as AutoDock can be applied as an initial screening method for natural antibacterial drug candidates. This approach has great potential to support the development of effective and safe phytopharmaceuticals in overcoming the global challenge of antibiotic resistance.

Keywords: Antibacterial, Molecular Docking, Plants

Abstrak. Resistensi antibiotik merupakan masalah serius di bidang kesehatan karena menurunkan efektivitas terapi dalam mengatasi infeksi bakteri. Oleh karena itu, pencarian agen antibakteri baru dari bahan alam menjadi penting. Salah satu pendekatan yang banyak digunakan adalah molekular docking, yang mampu memprediksi interaksi antara senyawa aktif tanaman dengan protein target bakteri secara cepat, efisien, dan hemat biaya. Artikel tinjauan ini merangkum hasil penelitian terkini mengenai potensi berbagai tanaman seperti daun kelor (*Moringa oleifera*), kunyit putih (*Curcuma zedoaria*), bawang putih (*Allium sativum*), jahe (*Zingiber officinale*), lempuyang (*Zingiber aromaticum*), rosela (*Hibiscus sabdariffa L.*), jeruk nipis (*Citrus aurantiifolia*), kumis kucing (*Orthosiphon stamineus Benth*), daun waru (*Hibiscus tiliaceus*), dan mangrove (*Rhizophora stylosa*) sebagai antibakteri. Senyawa bioaktif seperti quercetin, curcumenol, germacrone, alliin, gingerol, serta zerumbone dilaporkan memiliki afinitas ikatan baik terhadap protein target bakteri, termasuk DNA gyrase, MurE, dan PBP2. Beberapa senyawa bahkan menunjukkan nilai binding affinity mendekati atau lebih baik dibandingkan antibiotik standar. Dengan demikian, molekular docking menggunakan perangkat lunak seperti AutoDock dapat dijadikan tahap awal skrining kandidat obat antibakteri alami. Pendekatan ini berpotensi mendukung pengembangan fitofarmaka yang efektif dan aman dalam menghadapi resistensi antibiotik.

Kata kunci: Antibakteri, Molekular Docking, Tanaman

Received Februari 17, 2026; Revised Februari 18, 2026; Accepted Februari 19, 2026

*Adilla Nurafdilla Solihah, nurafdillasolihahadilla@gmail.com

LATAR BELAKANG

Tanaman merupakan salah satu sumber berbagai jenis senyawa-senyawa kimia yang memiliki khasiat sebagai obat. Kandungan senyawa kimia yang ada dalam tanaman disebut dengan fitokimia. Senyawa kimia memiliki banyak kegunaan, salah satunya yaitu dapat dijadikan sebagai sumber antioksidan alami. (Rajalakshmi. D & Narasimhan, 1985). Tanaman pangan memiliki beberapa kelebihan dibanding hewan yaitu, lebih sehat, lebih mudah dalam pengolahan, lebih mudah memperolehnya, serta relatif lebih murah. (Suherman et al., 2023). Upaya mencari agen antibakteri alami menjadi sangat mendesak karena banyaknya kasus resistensi terhadap antibiotik konvensional seperti amoxicillin dan ciprofloxacin, Meskipun telah banyak penelitian bahan alam yang memiliki aktivitas antibakteri, masih sedikit yang memanfaatkan pendekatan *in silico* khususnya molecular docking terhadap enzim target DNA gyrase yang berperan penting dalam replikasi DNA bakteri. Artikel ini bertujuan meninjau berbagai penelitian terkini terkait potensi senyawa aktif dari tanaman obat sebagai antibakteri melalui pendekatan molecular docking terhadap DNA gyrase.

Kelor atau *Moringa oleifera* (Lamk.) dikenal sebagai tumbuhan medis, atau medicinal plant yang memiliki banyak aktivitas biologis dan farmakologis. Beberapa aktivitas daun kelor seperti sebagai anti-peradangan/inflamasi, anti-bakteri, anti-nyeri/ analgesik, serta sebagai imunomodulator. (Islamiyat et al., 2023). Jahe memiliki senyawa bioaktif seperti gingerol, shogaol, dan zingeron yang berperan menghambat sekresi asam lambung serta melindungi mukosa lambung dari kerusakan akibat asam. (Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025) Pendekatan *in silico* telah banyak digunakan dalam identifikasi senyawa potensial sebagai kandidat obat, termasuk dalam studi mengenai jahe sebagai inhibitor pompa proton. (Amin & Nabila, 2025)

Kunyit putih merupakan salah satu jenis dari keluarga Zingiberaceae. Kunyit putih mempunyai kandungan utama kurkuminoid. Aktivitas farmakologi kunyit putih menunjukkan adanya efek antibakteri. (Suena et al., 2021) Penelitian yang dilakukan oleh (Astari et al., 2021) mengatakan bahwa kunyit memiliki aktivitas antibakteri. Bawang putih (*Allium sativum L.*) merupakan tanaman dari keluarga Alliaceae. (Untari, 2010). Bawang putih memiliki kandungan antraquinon, saponin, triterpenoid, flavonoid, Tanin. Zat aktif yang berfungsi sebagai antibakteri adalah flavonoid yang memiliki mekanisme menghambat sitoplasma fungsi membran dan menghambat sintesis asam nukleat. (Marbun et al., 2025) Potensi bawang putih sendiri telah dikenal sebagai antifungi, antiviral, antibakteri, antikanker, antelmintik, antihipertensi, anti-aterosklerosis, antisepтик dan juga anti-inflamasi, anti- atherosklerosi. (Kristiananda et al., 2022)

Jahe memiliki senyawa bioaktif seperti gingerol, shogaol, dan zingeron yang berperan menghambat sekresi asam lambung serta melindungi mukosa lambung dari kerusakan akibat asam (Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025) Selain itu, minyak atsiri dalam jahe berfungsi sebagai antibakteri. Lempuyang wangi memiliki daging rimpang berwarna keputihan dan berbau harum, dan berkhasiat sebagai pelangsing, Batangnya merupakan perpanjangan pelepah daun yang berbentuk bulat. Bagian tanaman yang banyak dimanfaatkan adalah bagian rimpang. mengandung minyak atsiri, saponin, flavonoid, dan tanin. Kandungan utama minyak atsiri adalah sesquiterpenoid zerumbone yang memiliki aktivitas biologis, antara lain sebagai antikanker dan antitumor. (Wahyuni et al., 2013)

Rosela (*Hibiscus sabdariffa L.*), yaitu tanaman dari famili Malvaceae yang banyak dibudidayakan di daerah tropis, termasuk Indonesia. Bagian yang paling sering dimanfaatkan adalah kelopak bunganya (calyx) yang berwarna merah tua, memiliki berbagai khasiat, seperti antioksidan, antihipertensi, hepatoprotektif, dan antibakteri. (Ramadhani et al., 2024). Jeruk nipis (*Citrus aurantiifolia*) merupakan buah yang mengandung beberapa senyawa, seperti minyak atsiri, vitamin C, vitamin B1, asam sitrat, asam amino, saponin, tanin, alkaloid, serta flavonoid, Senyawa tersebut memiliki efek biologis antara lain analgesik, antioksidan, antiinflamasi, antivirus, dan antimikroba. (Putri et al., 2025)

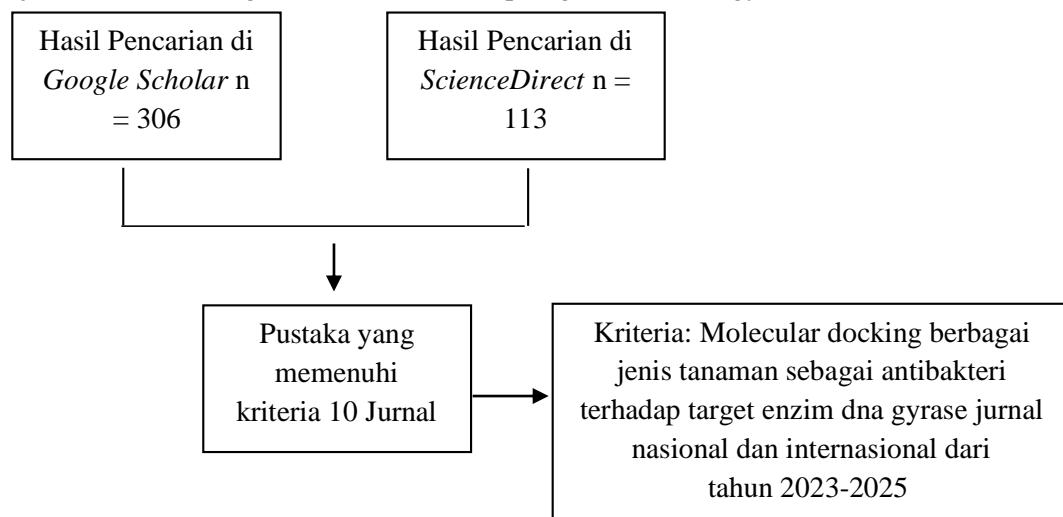
Hibiscus tiliaceus atau tanaman waru merupakan famili Malvaceae yang banyak ditemukan di negara Asia dan Australia. Khasiat daun waru tersebut karena kandungan senyawa bioaktif didalamnya. Senyawa tersebut diantaranya metabolit sekunder polifenol, saponin, flavonoid, dll. Metabolit sekunder digunakan oleh tanaman waru secara tidak langsung dalam pertumbuhan, reproduksi serta sistem pertahanan tanaman. (Fatma et al., 2025). Tumbuhan bakau (*Rhizophora stylosa*) merupakan salah satu tumbuhan pada habitat perairan dengan kondisi kadar garam tinggi yang berbatasan dengan wilayah perairan tawar. Habitat tumbuh tumbuhan inilah yang menyebabkan adanya perbedaan morfologi, fisiologi, dan mekanisme metabolisme mangrove dengan tumbuhan tingkat tinggi lainnya. Senyawa fitokimia tersebut teridentifikasi sebagai bagian dari golongan alkaloid, flavonoid, fenolik, tanin, saponin, dan terpenoid. *R. stylosa* telah lama digunakan sebagai obat tradisional pada beberapa wilayah di Indonesia. Pemanfaatannya sebagai obat tradisional diantaranya adalah sebagai antiradang, obat demam, dan asma. (Hadi et al., 2023)

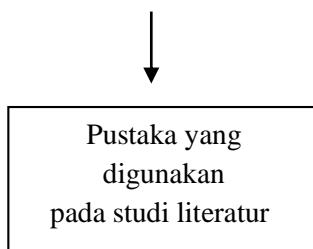
Resistensi terhadap antibiotik menjadi masalah bidang kesehatan karena menyebabkan ketidakefektifan terapi untuk melawan infeksi bakteri tertentu. Ketidak efektifan tersebut dapat berdampak fatal berupa kematian akibat penyakit infeksi. *Escherichia coli* adalah salah satu bakteri yang resistensi terhadap antibiotik, AMRIN-Study atau antimicrobial Resistance in Indonesia melaporkan bahwa 43 % *E. coli* mengalami resistensi antibiotik. (Tania et al., 2024) *Streptococcus pneumoniae* (*pneumococcus*) adalah bakteri gram positif penyebab penyakit pneumonia. *S. pneumoniae* mengkolonisasi permukaan infeksi paru yang ditandai adanya peradangan pada rongga alveolus. (Sulihah et al., 2025)

Molecular docking kini banyak dimanfaatkan dalam riset penemuan obat karena efisien dan hemat biaya dalam memprediksi interaksi ligan-protein. Metode ini juga digunakan untuk memahami cara ligan berinteraksi dengan reseptor dalam proses pengembangan obat (Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025). Rational Drug Design (RRD) adalah molecular docking mempercepat perancangan obat dengan mencocokkan senyawa dan reseptor aktif secara 3D untuk mengidentifikasi potensi efek farmakologis. Proses penemuan obat diakui cukup panjang dan mahal. Akibatnya, kecenderungan untuk menggunakan teknik kimia komputasional *in silico* dalam pemodelan molekuler (desain obat) masih banyak digunakan. Menurut statistik WHO tahun 2008, 68% populasi global terus bergantung pada sistem pengobatan tradisional, yang sebagian besar memanfaatkan tanaman untuk mengobati penyakit. (Saeful Amin & Tsani, 2025).

METODE PENELITIAN

Metode penelitian yang digunakan yaitu literature review dengan menggunakan bantuan database yaitu *google scholar* dan *ScienceDirect* dengan kata kunci “tanaman,” “antibakteri,” “molecular docking”. dalam bentuk referensi artikel dari tahun 2023-2025, artikel yang memenuhi kriteria inklusi dipilih dan dianalisis untuk mengeksplorasi molecular docking berbagai jenis tanaman sebagai antibakteri terhadap target enzim dna gyrase.





Grafik 1. Diagram Alir Pencarian Literatur

HASIL DAN PEMBAHASAN

Docking molekuler adalah salah satu alat dalam biologi molekuler struktural untuk mendesain obat dengan komputer. Studi berbasis komputasi atau molecular docking merupakan salah satu metode skrining untuk menemukan senyawa aktif yang berpotensi farmasi dari tumbuhan. Menggunakan studi penambatan molekuler dapat mengurangi biaya dan meningkatkan kemungkinan menemukan kandidat obat baru yang diinginkan, memungkinkan penemuan obat baru yang lebih efisien. Parameter validasi metode adalah nilai RMSD (Root Mean Square Deviation). RMSD merupakan jarak penyimpangan dari posisi ikatan native ligan dengan protein setelah di docking-kan terhadap posisi ikatan native ligan yang sebenarnya. Metode docking dikatakan valid jika memiliki nilai RMSD $\leq 2\text{\AA}$. (Pinzi & Rastelli, 2019)

Reverse atau inverse molecular docking (RMD) merupakan teknik rancang obat yang relatif baru. RMD dapat digunakan untuk melakukan skrining protein target yang potensial terhadap ligan. Teknik ini dapat diaplikasikan untuk mengenali aktivitas biologis yang belum diketahui atau aktivitas terapeutik kedua dari suatu obat, senyawa penuntun, produk alam dan ligan-ligan lainnya. (Kumar et al., 2014) Strategi spesifik untuk reverse docking dapat menggunakan perangkat lunak yang sudah ada, seperti Dock, MDock, Vina, Gold, FlexX, Maestro secara offline atau TarFisDock, PharmMapper, idTarget yang dapat diakses secara online. Zerumbon merupakan molekul kecil yang dihasilkan oleh *Z. zerumbet* dan dalam kuantitas yang dominan oleh karenanya senyawa ini merupakan marker dari spesies tanaman ini. (Ferwadi et al., 2017)

Setelah dilakukan review artikel, didapatkan beberapa sumber artikel mengenai berbagai tanaman yang memiliki aktivitas antibakteri.

Tabel 1. Hasil Analisis Artikel Penelitian

Referensi	Tanaman	Senyawa aktif	Sofware yang digunakan	Kesimpulan
(Islamiyah et al., 2023)	Daun Kelor (<i>Moringa Oleifera</i> (lamk.)	<i>Quercetin</i>	<i>Pubchem, RCSB PDB, PyRx 0.8, discovery studio.</i>	Hasil studi in silico menunjukkan bahwa senyawa quer diperkirakan memiliki potensi sebagai antibakteri dari bakteri <i>E. coli</i> namun aktivitasnya masih lebih kecil dari pada antibiotik chloramphenicol.
(Tania et al., 2024)	Kunyit putih (<i>Curcuma Zedoaria</i>)	<i>Curcumenol , germacroe</i>	<i>PyRx, PyMOL, Pubchem.</i>	Index inhibition konsentrasi 25% adalah konsentrasi ekstrak kunyit putih yang

				paling mendekati aktivitas ciprofloxacin. Ekstrak kunyit putih konsentrasi 10, 15 dan 25% belum memiliki daya bunuh terhadap pertumbuhan E. Coli. Curcumenol maupun Germacrone memenuhi standar sebagai obat karena memenuhi 5 kriteria Lipinski (Lipinski's five of rules) yaitu berat molekul < 500, koefisien logarithm of the octanol partition (LogP) <5, hydrogen bond donor (HBD) <5,
(Sulihah et al., 2025)	Bawang putih (<i>Allium Sativum L</i>)	<i>Allicin</i>	Pubchem, RCSB, SwissADME, pyrx, discovery studio.	alliin merupakan senyawa aktif dalam bawang putih yang paling potensial sebagai antibakteri pada penyakit pneumonia. Hasil dari penelitian insilico ini membutuhkan penelitian lebih lanjut dan lebih dalam mengenai mekanisme spesifik dengan penelitian invitro dan invivo serta dibutuhkan uji toksisitas pengobatan pneumonia.
(Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025)	Jahe (<i>Zingiber Officinale Roscoe</i>)	<i>Gingerol, shogaol, zingeron.</i>	Telaah pustaka di google scholar	Gingerol berpotensi dikembangkan sebagai alternatif alami dan lebih aman dari omeprazole, terutama untuk ibu hamil yang mengalami keluhan akibat peningkatan sekresi asam lambung. Senyawa shogaol dan zingeron juga memiliki aktivitas serupa meskipun dalam tingkat yang lebih rendah. Penelitian ini memperkuat potensi jahe sebagai kandidat fitofarmaka dan mendorong penelitian lanjutan untuk implementasi terapi yang lebih aman.
(Suherman et al., 2023)	Lempuyang wangi	<i>Zerumbone, isokaempferide</i>	<i>Autodock tools 1.5.7, Potein data bank, pubchem,</i>	Senyawa yang memiliki profil farmakokinetik paling baik dibandingkan ciprofloxacin

	(Zingiber aromaticum)		<i>KN ApSack, pkSCM, protox online tools, swissADME.</i>	adalah zerumbone. Senyawa uji yang memiliki nilai binding affinity lebih baik dari ciprofloxacin adalah isokaempferide, (-)-beta-Sitosterol, afzelin, kaempferol 3-(3'-acetylrhamnoside), dan 3-O-beta-D-Glucopyranosyl dengan nilai binding affinity berurutan yaitu -8,1 kcal/mol, -9,0 kcal/mol, -9,4 kcal/mol, -9,3 kcal/mol dan -9,3 kcal/mol.
(Ramadhan et al., 2024)	Ekstrak rosela (<i>Hibiscus sabdariffa L.</i>)	<i>Kaempferol-rutinosida</i>	<i>ChemOffice 19.1 (ChemDraw & Chem3D), AutoDockTools 1.5.7 & AutoDock 4.2.6, Discovery Studio Visualizer</i>	kaempferol-rutinosida merupakan senyawa paling potensial dari <i>Hibiscus sabdariffa</i> yang dapat dipilih sebagai senyawa utama (lead compound) untuk dikembangkan sebagai agen antibakteri terhadap MRSA. Senyawa flavonoid dengan ukuran molekul yang lebih besar dan energi total yang lebih tinggi akan meningkatkan interaksinya dengan PBP2a.
(Putri et al., 2025)	Jeruk nipis (<i>citrus aurantiifolia</i>)	<i>quercetin</i>	<i>ChemDraw Pro 12.0, MarvinSketch, PreADME, Toxtree v3.1.0, AutoDock Tools 1.5.7 & AutoDock, Discovery Studio Visualizer 2021</i>	senyawa Quercetin yang dapat berikatan dan berinteraksi dengan ligan-resptor yaitu protein (4ZVI: -4,63) sehingga dapat dikatakan memiliki pontensi aktivitas yang baik sebagai antibakteri berdasarkan studi in silico.
(Inayah et al., 2024)	Kumis kucing (<i>orthosiphon stamineus benth</i>)	<i>Sinensetin</i>	<i>ChemDraw Ultra 12.0, MarvinSketch, PreADMET, Toxtree v3.1.0, AutoDock Tools 1.5.7 & AutoDock,</i>	Nilai binding energy sinensetin adalah -6,05 kcal/mol, menunjukkan interaksi yang cukup kuat dengan protein target antibakteri DNA gyrase (PDB ID: 4ZVI) Secara keseluruhan, sinensetin berpotensi sebagai

			<i>Discovery Studio Visualizer 2021</i>	agen antibakteri berdasarkan analisis in silico.
(Fatma et al., 2025)	Daun waru (<i>hibiscus tiliaceus</i>)	<i>Hibiscoquinone A</i>	<i>KNAPSAcK Family, NCBI, SWISS ADME, WAY2DRUG PASS</i>	Daun waru (<i>Hibiscus tiliaceus</i>) mengandung senyawa aktif Hibiscoquinone A yang berpotensi sebagai kandidat antibakteri terhadap <i>E. coli</i> , didukung hasil in silico dan uji in vitro meskipun efeknya masih bersifat penghambatan (bakteriostatik) dan perlu penelitian lanjutan.
(Hadi et al., 2023)	<i>Ekstrak Mangrove rhizophora stylosa</i>	<i>Ergotamin, Ergosin, Taraxerol, Rhizophorin s C, Daucosterol</i>	<i>Marvin Sketch (ChemAxon), Discovery Studio Visualizer (Biovia), AutoDock Tools (ADT), dan AutoDock Vina</i>	Ekstrak etanolik <i>R. stylosa</i> memiliki aktivitas antibakteri terhadap <i>E. coli</i> dengan mekanisme perusakan dinding sel. Hasil in silico menunjukkan semua senyawa uji memiliki afinitas lebih tinggi dibanding amoxicillin pada protein target PBP.

Berdasarkan penelitian (Islamiyati et al., 2023) Penelitian ini membuktikan bahwa ekstrak daun kelor (*Moringa oleifera*) memiliki potensi sebagai antibakteri terhadap *Escherichia coli*. Hasil uji in silico menunjukkan bahwa senyawa quercetin, yang merupakan flavonoid utama pada daun kelor, mampu berikatan dengan enzim topoisomerase IV, salah satu enzim penting dalam proses replikasi DNA bakteri. Nilai energi ikatan quercetin adalah -6,4 kkal/mol, sedangkan antibiotik standar chloramphenicol memiliki nilai -7,3 kkal/mol. Hal ini menunjukkan bahwa chloramphenicol masih memiliki ikatan yang lebih kuat dibanding quercetin, sehingga aktivitas antibakterinya lebih tinggi. Dengan demikian, dapat disimpulkan bahwa daun kelor berpotensi untuk dikembangkan sebagai sumber antibakteri alami.

Berdasarkan penelitian (Tania et al., 2024) Uji molecular docking menunjukkan bahwa senyawa aktif kunyit putih, germacrone dan curcumenol, memiliki afinitas baik terhadap protein target *E. coli*. Germacrone lebih stabil daripada ciprofloxacin pada enzim MurE (-7,4 kkal/mol), sedangkan curcumenol sebanding dengan ciprofloxacin pada DNA Gyrase B (-7,0 kkal/mol). Interaksi utamanya berupa ikatan hidrofobik, yang mendukung potensi kunyit putih sebagai antibakteri dengan mekanisme menghambat biosintesis dinding sel dan replikasi DNA.

Berdasarkan penelitian (Sulihah et al., 2025) Hasil docking menunjukkan empat senyawa bawang putih memenuhi Lipinski's Rule dan dapat berikatan dengan protein target PBP2. Alliin memiliki afinitas terbaik (-5,1 kkal/mol), meski masih lebih rendah dari benzylpenicillin (-6,5 kkal/mol). Ikatan utama terjadi pada residu aktif PBP2 melalui ikatan hidrogen. Secara keseluruhan, senyawa bawang putih, terutama alliin, berpotensi menghambat sintesis dinding sel bakteri meski belum sekuat antibiotik standar.

Berdasarkan penelitian (Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025) Uji molecular docking menunjukkan bahwa senyawa bioaktif jahe mampu berinteraksi dengan enzim H⁺/K⁺ ATPase (target omeprazole) yaitu Gingerol memiliki afinitas terbaik (-8,2 kcal/mol), hampir setara dengan omeprazole (-8,5 kcal/mol), serta berikatan pada residu aktif yang sama (Glu820, Arg841, Thr825). Shogaol menunjukkan afinitas cukup kuat (-7,9 kcal/mol) dengan ikatan pada Glu820 dan Phe826. Zingeron memiliki afinitas terendah (-7,5 kcal/mol), tetapi tetap berinteraksi pada situs aktif (Glu820, Asn792). Hasil ini menegaskan bahwa gingerol adalah kandidat utama

dengan mekanisme kerja mirip omeprazole, sedangkan shogaol dan zingeron tetap berpotensi meski lebih lemah.

Berdasarkan penelitian (Suherman et al., 2023) Empat senyawa bioaktif jahe (gingerol, shogaol, zingeron, dan zingiberen) diuji melalui molecular docking terhadap protein target bakteri. Gingerol menunjukkan binding affinity terbaik, sehingga diprediksi sebagai senyawa paling potensial menghambat enzim bakteri. Shogaol dan zingeron juga memiliki afinitas cukup baik, meskipun lebih rendah dibanding gingerol. Zingiberen memiliki nilai afinitas terendah, tetapi tetap mampu berinteraksi dengan situs aktif protein. Interaksi senyawa-senyawa ini dengan residu penting enzim bakteri berpotensi mengganggu fungsi vital sel, sehingga menghambat pertumbuhan bakteri.

Berdasarkan penelitian (Ramadhani et al., 2024) hasil molecular docking flavonoid dari ekstrak rosela (*Hibiscus sabdariffa*) mampu berinteraksi dengan protein target PBP2a pada MRSA, meskipun afinitasnya masih lebih rendah dibanding ligan pembanding ceftobiprole. Dari semua senyawa yang diuji, kaempferol-3-rutinoside menunjukkan afinitas terbaik dengan nilai energi ikatan bebas -7,33 kcal/mol dan membentuk tujuh ikatan hidrogen, sehingga dinilai paling potensial sebagai lead compound. Faktor ukuran molekul dan energi total ligan berperan penting dalam meningkatkan kestabilan kompleks ligan–reseptor.

Berdasarkan penelitian (Putri et al., 2025) Hasil molecular docking menunjukkan bahwa Quercetin dari jeruk nipis (*Citrus aurantiifolia*) mampu berikatan dengan protein target antibakteri DNA gyrase (PDB ID: 4ZVI) dengan nilai binding energy -4,63 kcal/mol, menandakan interaksi yang stabil meskipun lebih rendah dibanding ligan alami. Quercetin memenuhi aturan Lipinski's rule sehingga berpotensi sebagai kandidat obat, namun hasil uji toksisitas menempatkannya pada kategori toksisitas tinggi (Class III) sehingga perlu kajian lanjutan untuk pengembangan lebih aman sebagai antibakteri.

Berdasarkan penelitian (Inayah et al., 2024) Hasil *in silico* menunjukkan bahwa sinensetin dari kumis kucing (*Orthosiphon stamineus*) mampu berikatan stabil dengan protein target antibakteri DNA gyrase (PDB ID: 4ZVI) dengan nilai binding energy -6,05 kcal/mol. Senyawa ini memenuhi aturan Lipinski, memiliki profil ADME yang baik, serta diprediksi tidak toksik, sehingga dinilai berpotensi untuk dikembangkan sebagai kandidat antibakteri.

Berdasarkan penelitian (Fatma et al., 2025) Analisis *in silico* menunjukkan bahwa senyawa Hibiscoquinone A dari daun waru (*Hibiscus tiliaceus*) berpotensi sebagai kandidat antibakteri. Berdasarkan prediksi SWISS ADME, senyawa ini memenuhi kriteria kandidat obat karena mudah diserap tubuh dan memiliki sifat lipofilik yang baik. Hasil WAY2DRUG PASS Prediction memperlihatkan aktivitas antibakteri kategori sedang (Pa 0,356), serta potensi sebagai lipid peroxidase inhibitor (Pa 0,798) dan ubiqinol-cytochrome-c reductase inhibitor (Pa 0,818), yang mekanismenya dapat mengganggu pembentukan energi dan memicu stres oksidatif pada bakteri.

Berdasarkan penelitian (Hadi et al., 2023) Analisis *in silico* menunjukkan bahwa senyawa aktif mangrove *Rhizophora stylosa*, khususnya ergotamin, memiliki afinitas ikatan lebih tinggi dibanding amoxicillin terhadap protein target PBP pada *E. coli*. Interaksi melalui ikatan hidrogen dan hidrofobik pada residu aktif memperkuat potensi senyawa ini sebagai antibakteri dengan mekanisme menghambat pembentukan dinding sel bakteri.

KESIMPULAN DAN SARAN

Pendekatan molecular docking mampu mengidentifikasi berbagai senyawa alami yang memiliki potensi antibakteri, dengan beberapa menunjukkan afinitas lebih tinggi dibanding antibiotik standar. Kajian ini hanya bersifat *in silico* dan menggunakan data sekunder dari jurnal, belum dilakukan uji *in vitro* maupun *in vivo* untuk mengonfirmasi aktivitas biologisnya. Disarankan penelitian lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* untuk memvalidasi hasil docking, serta eksplorasi kombinasi senyawa tanaman untuk meningkatkan aktivitas antibakteri. Hasil ini dapat

menjadi dasar pengembangan fitofarmaka antibakteri berbasis tanaman lokal Indonesia guna menghadapi tantangan resistensi antibiotik global.

DAFTAR PUSTAKA

- Amin, S., & Nabila, L. S. (2025). Review Artikel : Peran Pendekatan In Silico Dalam Kimia Medisinal. *Indonsian Journal of Science*, 1(6), 1345–1349.
- Astari, S. M., Rialita, A., & Mahyarudin, M. (2021). Aktivitas Antibakteri Isolat Bakteri Endofit Tanaman Kunyit (Curcuma longa L.) Terhadap Pertumbuhan Staphylococcus aureus. *Jurnal Fitofarmaka Indonesia*, 8(2), 9–16. <https://doi.org/10.33096/jffi.v8i2.644>
- Dinda Nurhayati Famili, & Saeful Amin. (2025). Studi Docking in Silico Analisis Potensi Jahe (Zingiber Officinale Roscoe) Sebagai Obat Pengganti Omeprazole Untuk Ibu Hamil. *Journal of Public Health Science*, 2(2), 197–203. <https://doi.org/10.70248/jophs.v2i2.2220>
- Fatma, N. A., Fitria, F. N., Siswanto, H. M., Sofa, N., R., I. S., Sa'adah, R. F. N., Wijaya, M. A. H., Fitriyah, F., & Saefi, M. (2025). ANALISIS SENYAWA AKTIF DAUN WARU (Hibiscus tiliaceus) SEBAGAI ANTIBAKTERI TERHADAP Escherichia coli. *Biology Natural Resources Journal*, 3(2), 93–99. <https://doi.org/10.55719/binar.v3i2.1557>
- Ferwadi, S., Rahmat, G., & Astuti, W. (2017). Molecular Docking Study of Cinnamate Acid Compound and its Derivatives as Protein 1J4X Inhibitor to Cervical Cancer Cell. *Jurnal Kimia Mulawarman*, 14(2), 84–90. <http://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?>
- Hadi, I., Ulfah, M., Efriani, L., & Putra, T. A. (2023). STUDI IN SILICO DAN IN VITRO: AKTIVITAS ANTIBAKTERI EKSTRAK ETANOLIK MANGROVE (Rhizophora stylosa) DENGAN TARGET PERUSAKAN DINDING SEL Escherichia coli. *Medical Sains : Jurnal Ilmiah Kefarmasian*, 8(2), 549–558. <https://doi.org/10.37874/ms.v8i2.617>
- Inayah, I., Hadisoebroto, G., & Aini, F. N. (2024). Studi In Silico Senyawa dari Herba Sambiloto (Andrographis paniculata) terhadap Protein Dihydrofolate Reductase (4KM2) pada Mycobacterium tuberculosis. *Jurnal Sabdariffarma*, 12(1), 32–50. <https://doi.org/10.53675/jsfar.v12i1.1317>
- Islamiyati, D., Husen, F., & Ina Ratnaningtyas, N. (2023). Potensi aktivitas antibakteri ekstrak moringa oleifera (Lamk.) terhadap bakteri escherichia coli secara in silico dan in vitro. *Jurnal Bina Cipta Husada: Jurnal Kesehatan Dan Science*, 19(2), 80–90.
- Kristiananda, D., Allo, J. L., Widayarahma, V. A., Lusiana, L., Noverita, J. M., Octa Riswanto, F. D., & Setyaningsih, D. (2022). AKTIVITAS BAWANG PUTIH (Allium sativum L.) SEBAGAI AGEN ANTIBAKTERI. *Jurnal Ilmu Farmasi Dan Farmasi Klinik*, 19(1), 46. <https://doi.org/10.31942/jiffk.v19i1.6683>
- Kumar, V., Gimarellos-bourboulis, E. J., Martens, J. H. A., Rao, N. A., Aghajanirefah, A., Manjeri, G. R., Li, Y., Daniela, C., Arts, R. J. W., Meer, B. M. J. W. Van Der, Deen, P. M. T., Logie, C., Luke, A., Neill, O., Willems, P., Veerdonk, F. L. Van De, & Meer, J. W. M. Van Der. (2014). mTOR/HIF1 α -mediated aerobic glycolysis as metabolic basis for trained immunity. *Science*, 345(6204), 1–18. <https://doi.org/10.1126/science.1250684.mTOR/HIF1>
- Marbun, E. D., Sapitri, A., & Arisetya, D. (2025). Formulasi dan Evaluasi Sediaan Obat Kumur Dari Ekstrak Fermentasi Bawang Lanang (Allium sativum L.). *Herbal Medicine Journal*, 8(1), 5–12.
- Pinzi, L., & Rastelli, G. (2019). Molecular docking: Shifting paradigms in drug discovery. *International Journal of Molecular Sciences*, 20(18). <https://doi.org/10.3390/ijms20184331>
- Putri, A. M. H., Dwi Mulyana, S., Aini, R. E. F. N., Syafi'in, N. P., Mahmudah, N. A. L., & Ats-Tsaqiiyah, N. J. (2025). Studi In Silico Nanopartikel Perak dengan Jeruk Nipis (Citrus aurantiifolia) sebagai Antibakteri. *Jurnal Farmasi Tinctura*, 6(2), 111–125. <https://doi.org/10.35316/tinctura.v6i2.7315>
- Rajalakshmi, D., & Narasimhan, S. (1985). Antioxidants: Sources and Methods of Evaluation dalam D.L. Madhavi: Food Antioxidant, Technological, Toxicological and Health Perspectives. Marcel. *MarcelDekker Inc., Hongkong*, 5(1), 76–77.

- Ramadhani, F. A., Prastika, M. F., Fikriyah, N., Isnaeni, & Diyah, N. W. (2024). Molecular Docking of Flavonoids from Extract of Roselle (*Hibiscus sabdariffa L.*) Calyx on PBP2a as the Basis for Antibacterial Activity Against Methicillin Resistant *Staphylococcus aureus*. *Science and Technology Indonesia*, 9(2), 487–493. <https://doi.org/10.26554/sti.2024.9.2.487-493>
- Saeful Amin, & Tsani, G. A. (2025). Tinjauan Literatur: Molecular Docking Fitokimia Indonesia Terhadap Target Terapeutik Empat Jenis Kanker. *Journal of Public Health Science*, 2(2), 183–190. <https://doi.org/10.70248/jophs.v2i2.2191>
- Suena, N. M. D. S., Suradnyana, I. G. M., & Juanita, R. A. (2021). Formulation and Antioxidant Activity Test of Effervescent Granule from Extract Combination of White Turmeric (*Curcuma zedoaria*) and Turmeric (*Curcuma longa L.*). *Jurnal Ilmiah Medicamento*, 7(1), 27–31.
- Suherman, A. W. U., Hernawati, D., & Putra, R. R. (2023). Analisis In Silico : Aktivitas Senyawa Antibakteri dalam Zingiber aromaticum terhadap *Salmonella typhi*. *Bioscientist : Jurnal Ilmiah Biologi*, 11(1), 620. <https://doi.org/10.33394/bioscientist.v11i1.7636>
- Sulihah, N. T., Baidowi, I. I., Firdaus, J., & Wulan, H. N. (2025). Uji Aktivitas Antibakteri Senyawa Bawang Putih (*Allium Sativum L.*) secara In Silico Terhadap Bakteri *Streptococcus Pneumoniae*. *Community Medicine and Public Health of Indonesia*, 5(3), 315–323.
- Tania, P. O. A., Listyawati, A. F., Soekanto, A., Simamora, D., & Purbowati, R. (2024). Studi Invitro dan Insilico Efektivitas Antibakteri Kunyit Putih Terhadap Hambatan Pertumbuhan *Escherichia Coli*. *The Indonesian Journal of Infectious Diseases*, 10(1), 47–67. <https://doi.org/10.32667/ijid.v10i1.188>
- Untari, I. (2010). Bawang Putih Sebagai Obat Paling Mujarab Bagi Kesehatan. *Gaster*, 7(1), 547–554. <https://www.jurnal.stikes-aisiyah.ac.id/index.php/gaster/article/view/59>
- Wahyuni, S., Bermawie, N., & Kristina, N. N. (2013). Morphological Characteristic, Yield Potential, and Major Rhizome Constituent of Nine Accession Numbers of Wild Ginger. *Jurnal Littri*, 19(3), 99–107.