

**ANALISIS DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA  
AKTIF TUMBUHAN NANAS KERANG TERHADAP MUTAN *RpoB*  
D435V *MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS***



**SKRIPSI**

**CHESA ANNISATU SOLEKHA  
1908010035**

**PROGRAM STUDI SARJANA FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PURWOKERTO  
2025**

**ANALISIS DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA  
AKTIF TUMBUHAN NANAS KERANG TERHADAP MUTAN *RpoB*  
D435V *MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS***



**SKRIPSI**

Diajukan sebagai salah satu syarat  
untuk memperoleh gelar sarjana farmasi

**CHESA ANNISATU SOLEKHA  
1908010035**

**PROGRAM STUDI SARJANA FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PURWOKERTO  
2025**

**HALAMAN PERSETUJUAN**

**ANALISIS DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA AKTIF  
TUMBUHAN NANAS KERANG TERHADAP MUTAN *RpoB* D435V  
*MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS***

**CHESA ANNISATU SOLEKHA**

**1908010035**

**Skripsi ini telah disetujui pembimbing untuk dipertahankan dalam sidang  
skripsi**

**Pada hari Rabu tanggal 30 Juli 2025**



**Pembimbing I**

A handwritten signature in blue ink, appearing to be "Fitriyani".

**apt. Fitriyani, M.S.Farm**

**NIK. 2160743**

**Pembimbing II**

A handwritten signature in blue ink, appearing to be "Aditya Singgih Raharjo".

**apt. Aditya Singgih Raharjo, M.Farm**

**NIK. 2160995**

HALAMAN PENGESAHAN

ANALISIS DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA AKTIF  
TUMBUHAN NANAS KERANG TERHADAP MUTAN *RpoB* D435V  
*MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS*

CHESA ANNISATU SOLEKHA

NIM. 1908010035

Telah dipertahankan di depan Panitia Ujian Skripsi

Pada hari Jumat tanggal 09 Agustus 2025

**Ketua**  
  
Assoc. Prof. apt. Binar Asrining Dhiani, Ph.D  
NIK. 2160392

**Sekretaris**  
  
Dr. Asriyenti Djaliasrin Djali, M.Si  
NIP. 197405222000122001

**Penguji I**  
  
apt. Fitriyani, M.S.Farm  
NIK. 2160743

**Penguji II**  
  
apt. Aditya Singgih Raharjo, M.Farm  
NIK. 2160995



Mengetahui,

Dekan Fakultas Farmasi

Universitas Muhammadiyah Purwokerto



  
Assoc. Prof. apt. Binar Asrining Dhiani, Ph.D

NIK. 2160392

## HALAMAN PERNYATAAN ORISINILITAS

Saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : Chesa Annisatu Solekha  
Nim 1908010035  
Program Studi : S1 Farmasi  
Fakultas : Farmasi  
Perguruan Tinggi : Universitas Muhammadiyah Purwokerto,

Menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa skripsi ini adalah hasil karya saya dan semua sumber baik yang dikutip maupun yang di rujuk telah saya nyatakan dengan benar serta bukan hasil penjiplakan dari karya orang lain.

Demikian pernyataan ini saya buat dan apabila kelak dikemudian hari terbukti ada unsur penjiplakan, saya bersedia mempertanggungjawabkan sesuai dengan ketentuan yang berlaku.



Purwokerto, 9 Agustus 2025

Chesa Annisatu Solekha

## MOTTO

يُسْرًا أَلَيْسَ أَلَيْسَ مَعَ إِنَّ، يُسْرًا أَلَيْسَ مَعَ فَإِنَّ

“Maka sesungguhnya bersama kesulitan itu ada kemudahan. Sesungguhnya bersama kesulitan itu ada kemudahan”

(Q.S.Al-Insyirah, 94:5-6)

“Long story short, I survive”

“Skripsi yang baik adalah skripsi yang selesai”



## HALAMAN PERSEMBAHAN

Bismillahirrahmanirrahim,

Puji syukur penulis panjatkan terhadap kehadiran Allah SWT yang telah memberikan kemudahan, kelancaran, dan petunjuk untuk menyelesaikan skripsi. Oleh karena itu, penulis ingin mengucapkan banyak terimakasih kepada beberapa pihak yang selalu mendukung dan membersamai saya baik dalam hal waktu, tempat, perhatian, dan semua kebaikan yang telah banyak membantu saya dan yang pasti semua itu tidak bisa saya sebutkan satu persatu. Terimakasih penulis ucapkan kepada :

1. Allah SWT yang telah memberikan petunjuk, kemudahan, dan rahmat sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan lancar tanpa suatu halangan yang memberatkan.
2. Orang tua saya serta saudara tercinta yaitu Ibu Sariyem dan Bapak Sujarni, suami tercinta saya Praka Agus Prasetyo serta anak saya Prawira Atharrazka Prasetyo dan saudara kandung saya Nuari Anisa Sivi, S.Kom.,M.Ti. yang doanya selalu dipanjatkan untuk saya, memberikan bantuan dan dukungan baik material maupun moral, dan selalu memberikan saya semangat dan motivasi untuk menyelesaikan skripsi.
3. Dosen pembimbing skripsi terbaik saya apt. Fitriyani, M.S.Farm selaku pembimbing 1 dan bapak apt. Aditya Singgih Rahardjo, M.Farm selaku pembimbing ke 2 yang selalu memberikan arahan kepada saya dengan sabar dan teliti dalam membimbing, dan membagi ilmunya sehingga penyusunan skripsi saya selesai. Semoga Ibu dan bapak selalu diberi kesehatan, di panjangkan umurnya, diberi kebaikan dan keberkahan.
4. Dosen pembimbing akademik saya apt. Dina Ratna Jwita, M.Farm.klin yang telah membimbing dan mendukung saya dalam proses perkuliahan.
5. Kepada teman-teman saya yang tidak bisa kami sebutkan satu persatu yang telah memberi saya banyak semangat dalam proses penyusunan skripsi ini.
6. Seluruh dosen farmasi yang telah memberikan bimbingan dan arahan selama belajar di fakultas farmasi.
7. Seluruh pihak yang tidak bisa saya sebutkan satu persatu

## KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas berkat dan rahmat- Nya, dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul. Analisis docking dinamika molekuler senyawa aktif tumbuhan Nanas kerang Terhadap Mutan *RpoB* D435V *Mycobacterium Tuberculosis*. Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Muhammadiyah Purwokerto.

Penulis menyadari bahwa tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, dari masa perkuliahan sampai pada penyusunan skripsi ini, sangatlah sulit untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada yang terhormat:

- (1) Assoc. Prof. Dr. Jebul Suroso, S.Kp., Ns., M.Kep. selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Purwokerto
- (2) apt. Binar Asrining Dhiani, Ph.D. selaku Dekan Farmasi yang telah memberi berbagai informasi dan bimbingan tentang tata laksana penyusunan skripsi;
- (3) apt. Suparman, Ph.D., selaku Ketua Program Studi S1 Farmasi yang telah memberi berbagai informasi dan bimbingan tentang tata laksana penyusunan skripsi;
- (4) apt. Fitriyani, M.S.Farm selaku dosen pembimbing 1 dan apt. Aditya Singgih Raharjo, M.Farm selaku pembimbing ke 2 yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan dalam penyusunan skripsi ini;
- (5) Bapak dan ibu serta saudara tercinta yang telah memberikan bantuan dan dukungan baik material maupun moral; serta

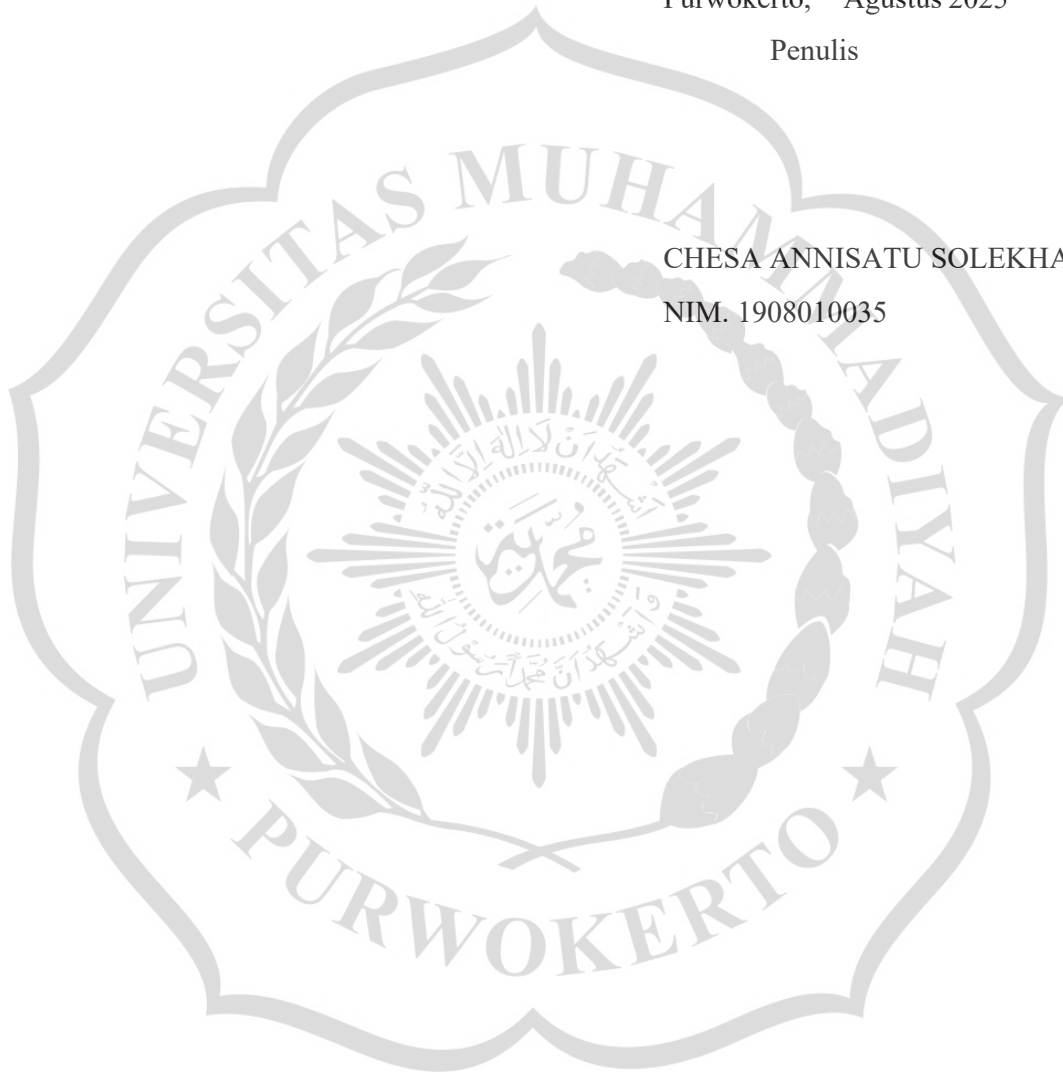
Akhir kata semoga Allah SWT memberikan balasan atas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi pengembangan ilmu. Aamiin.

Purwokerto, Agustus 2025

Penulis

CHESA ANNISATU SOLEKHA

NIM. 1908010035



**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN  
PUBLIKASI SKRIPSI UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

---

**Sebagai sivitas akademika Universitas Muhammadiyah Purwokerto dan demi pengembangan ilmu pengetahuan, saya yang bertanda tangan dibawah ini:**

Nama : Chesa Annisatu Solekha  
NIM : 1908010035  
Program Studi : S1 Farmasi  
Perguruan Tinggi : Universitas Muhammadiyah Purwokerto  
Jenis karya : Skripsi

Menyetujui untuk memberikan HAK Bebas Royalti Noneksklusif ( Non-exclusive Royalty-Free Right) kepada Universitas Muhammadiyah Purwokerto atas karya ilmiah saya yang berjudul : Analisis Docking dan Dinamika Molekuler Senyawa Aktif Tumbuhan Nanas Kerang Terhadap Mutan *RpoB* D435V *Mycobacterium Tuberculosis*. Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Muhammadiyah Purwokerto berhak menyimpan, mengalihmedia/ mengalih formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (database), merawat, dan mempublikasikan skripsi saya dengan tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Purwokerto

Pada tanggal : 13 Agustus 2025

Yang menyatakan,



Chesa Annisatu Solekha

1908010035

## RIWAYAT HIDUP

**Nama** : Chesa Annisatu Solekha  
**Tempat dan tanggal lahir** : Batangharjo, 30 April 2001  
**Orang tua** : Sujarni, Sariyem  
**Alamat** : ASMIL YONIF 406/CK Rt/Rw  
004/005 Bojong, Kec.Purbalingga,  
Kab.Purbalingga, Jawa Tengah.

: 081326684484

**No. HP**

**Alamat email** : [chesaannisa111@gmail.com](mailto:chesaannisa111@gmail.com)

### Riwayat Pendidikan

- a. Sekolah Dasar : SD N 1 Bale Rejo
- b. Sekolah Menengah Pertama : MTs N 1 Lampung Timur
- c. Sekolah Menengah Atas : SMK Muhammadiyah 3 Metro

**Pengalaman kerja** : -

**Publikasi** : -

**Penghargaan akademik** : -

**Beasiswa** : -

**Keanggotaan dalam organisasi** : - PCC 2020-2021

- IMM 2020 2021

- Persit Kartika Chandra

Kirana 2022- Sekarang

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PERSETUJUAN.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN .....	iii
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS .....	iv
ORISINALITAS.....	v
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	vi
KATA PENGANTAR.....	vii
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI .....	ix
RIWAYAT HIDUP .....	x
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR TABEL .....	xiii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN .....	xv
ABSTRAK .....	xvi
ABSTRACT.....	xvii
<b>BAB I PENDAHULUAN.....</b>	<b>1</b>
A. Latar Belakang.....	1
B. Perumusan Masalah.....	3
C. Tujuan Penelitian .....	3
D. Manfaat Penelitian.....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....</b>	<b>4</b>
A. Penelitian Terdahulu.....	4
B. Landasan Teori .....	7
1. Tuberkulosis .....	7
2. MDR-TB.....	8
3. RPOB .....	9
4. Nanas Kerang ( <i>Rhoeo spathacea</i> ) .....	9
5. Molecular Docking .....	10
6. Dinamika Molekuler.....	11
C. Perangkat Lunak .....	12
a. MOE (Molecular Operating Environment).....	12
b. Protein Data Bank (PDB) .....	12
c. PubChem.....	13

D. Kerangka konsep .....	14
E. Hipotesis .....	14
<b>BAB III METODE PENELITIAN .....</b>	<b>15</b>
A. Jenis Penelitian dan Rancangan Penelitian.....	15
B. Variabel Penelitian .....	15
C. Definisi Variabel Operasional .....	15
D. Waktu dan tempat penelitian .....	16
E. Alat dan bahan .....	17
F. Prosedur penelitian .....	17
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>19</b>
A. Hasil Penelitian dan Pembahasan .....	19
1. Penyiapan Struktur .....	19
2. Preparasi Ligan .....	20
3. Pemodelan Dan Validasi Struktur Protein.....	20
4. Docking Moleculer Senyawa Nanas Kerang.....	26
5. Simulasi Dinamika Molekuler.....	31
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>38</b>
A. Kesimpulan.....	38
B. Saran.....	38
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>39</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>44</b>

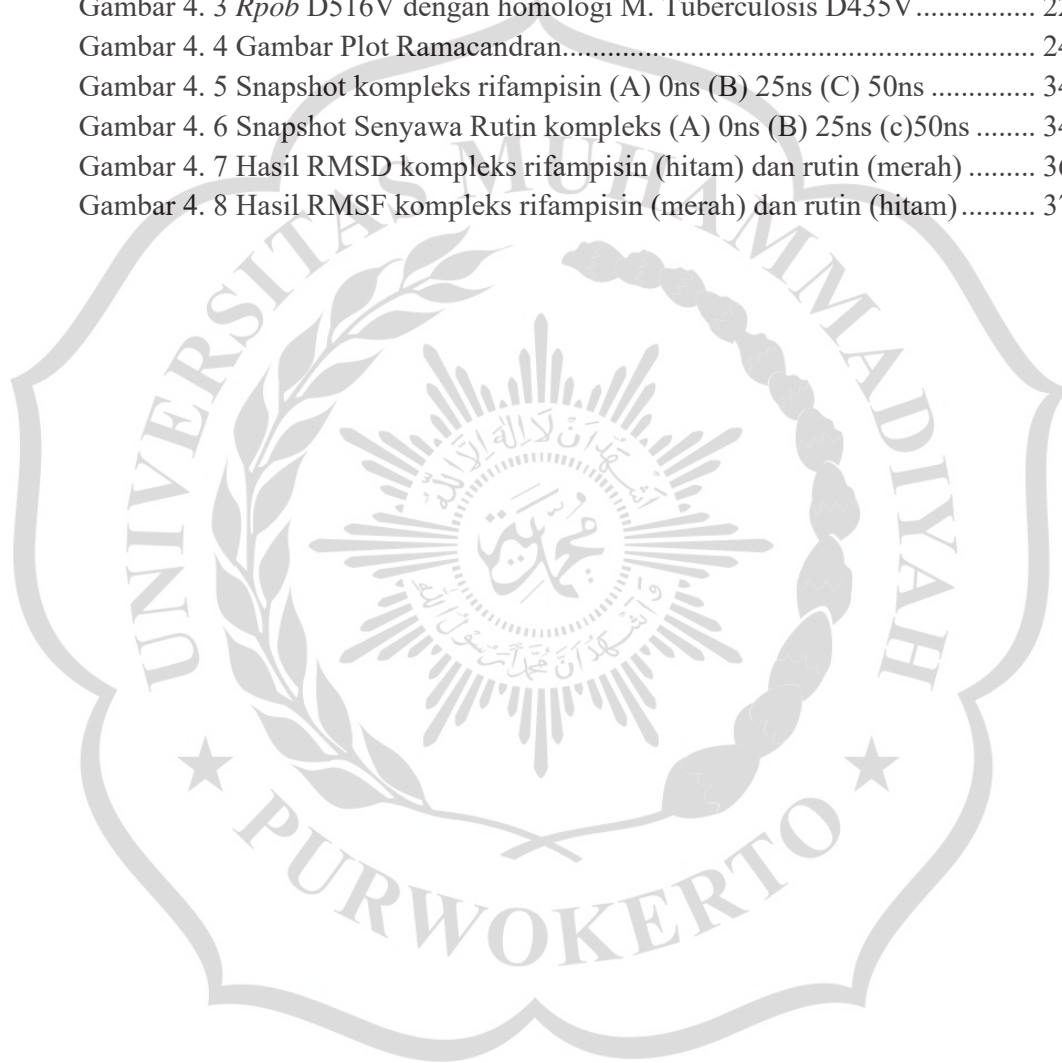
## DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Penelitian Terdahulu .....	4
Tabel 4. 1 Docking senyawa Rifampicin dengan senyawa Nanas Kerang .....	26
Tabel 4. 2 Visualisasi 2D .....	28



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Daun nanas kerang (Hariana, 2013).....	9
Gambar 2. 2 Kerangka Konsep .....	14
Gambar 4. 1 Penyesuaian squeen protein <i>RpoB</i> dari bakteri E.coli dan M. tuberculosis .....	22
Gambar 4. 2 (A) sebelum dan (B)sesudah preparasi 5UAC .....	22
Gambar 4. 3 <i>Rpob</i> D516V dengan homologi M. Tuberculosis D435V.....	22
Gambar 4. 4 Gambar Plot Ramacandran.....	24
Gambar 4. 5 Snapshot kompleks rifampisin (A) 0ns (B) 25ns (C) 50ns .....	34
Gambar 4. 6 Snapshot Senyawa Rutin kompleks (A) 0ns (B) 25ns (c)50ns .....	34
Gambar 4. 7 Hasil RMSD kompleks rifampisin (hitam) dan rutin (merah) .....	36
Gambar 4. 8 Hasil RMSF kompleks rifampisin (merah) dan rutin (hitam).....	37



## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran. 1 Sebelum prepassi 5UAC .....	44
Lampiran. 2 Sesudah prepassi 5UAC .....	44
Lampiran. 3 Hasil docking rutin .....	45
Lampiran. 4 Hasil docking <i>peltatoside</i> .....	45
Lampiran. 5 Hasil docking ferulic acid.....	46
Lampiran. 6 Hasil docking rifampicin .....	46
Lampiran. 7 Hasil docking <i>tradecantoside</i> .....	46



ANALISIS DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA AKTIF  
TUMBUHAN NANAS KERANG TERHADAP MUTAN *RpoB* D435V *MYCOBACTERIUM*  
*TUBERCULOSIS*

ABSTRAK

Chesa Annisatu Solekha<sup>1</sup>, Fitriyani<sup>2</sup>, Aditya Singgih Raharjo<sup>3</sup>

**Latar Belakang** : Nanas kerang (*Rhoeo spathacea*) telah terbukti memiliki aktivitas *antiinflamasi*, *antifertilitas* (Professor et al., 2021). Tumbuhan nanas kerang dapat berguna sebagai terapi alternatif pelengkap dalam memerangi munculnya strain MDR dari *Mycobacterium tuberculosis*. Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui yaitu interaksi senyawa yang terkandung dalam Nanas kerang secara *in silico* terhadap mutasi gen *RpoB* *Mycobacterium tuberculosis* melalui docking molekuler. Dalam docking molekuler memprediksi ada tidaknya interaksi antar dua molekul dengan hasil suatu model yang saling mengikat. **Metode** : Simulasi dinamika molekuler dengan mengatur suhu, pH, dan air dengan melihat RMSD dan RMSF. **Hasil** : senyawa aktif Nanas kerang dengan mutan *RpoB* D435V menunjukkan bahwa semua senyawa uji (*rutin*, *peltatoside*, *tradecantoside*, dan *ferulic acid*), senyawa rutin memiliki afinitas pengikatan terbaik, dengan nilai binding affinity -12,1905 kkal/mol, dibandingkan ligan pembanding rifampisin. Dan nilai RMSD yang rendah dan konsisten (<1,5 nm) serta nilai RMSF yang rendah pada residu kunci, yang mengindikasikan bahwa rutin memiliki potensi sebagai inhibitor stabil terhadap protein mutan tersebut. **Kesimpulan** : Interaksi senyawa aktif Nanas kerang dengan mutan *RpoB* D435V mampu berikatan dengan protein target melalui ikatan hidrogen dan hidrofobik. Dan menghasilkan Kestabilan interaksi antara rutin dan mutan *RpoB* D435V menunjukkan kestabilan kompleks yang baik.

**Kata Kunci** : *Mycobacterium tuberculosis*, Nanas Kerang, *RpoB*, Docking Molekuler.

ANALISIS DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA AKTIF  
TUMBUHAN NANAS KERANG TERHADAP MUTAN *RpoB* D435V *MYCOBACTERIUM*  
*TUBERCULOSIS*

**ABSTRACT**

Chesa Annisatu Solekha<sup>1</sup>, Fitriyani<sup>2</sup>, Aditya Singgih Raharjo<sup>3</sup>

**Background:** Pineapple shells (*Rhoeo spathacea*) has been shown to possess anti-inflammatory and antifertility activities (Professor et al., 2021). Pineapple shells plants can be useful as a complementary alternative therapy in combating the emergence of MDR strains of *Mycobacterium tuberculosis*. This study was conducted to determine the in silico interaction of compounds contained in Pineapple shells with the *RpoB* gene mutation of *Mycobacterium tuberculosis* through molecular docking. Molecular docking predicts the presence or absence of interactions between two molecules, resulting in a binding model. **Methods:** Molecular dynamics simulations by adjusting temperature, pH, and water content to observe the RMSD and RMSF. **Results:** The active compounds of Pineapple shells with the *RpoB* D435V mutant showed that of all the test compounds (rutin, peltatoside, tradecantoside, and ferulic acid), rutin had the best binding affinity, with a binding affinity value of -12.1905 kcal/mol, compared to the reference ligand rifampicin. The low and consistent RMSD value (<1.5 nm) and low RMSF values at key residues indicate that rutin has the potential to be a stable inhibitor of the mutant protein. **Conclusion:** The interaction of the active compound from Pineapple shells with the *RpoB* D435V mutant is capable of binding to the target protein through hydrogen and hydrophobic bonds. This results in a stable interaction between rutin and the *RpoB* D435V mutant, indicating good complex stability.

**Keywords:** *Mycobacterium tuberculosis*, Pineapple shells, *RpoB*, Molecular Docking.