



POTENSI ANTIBAKTERI SENYAWA 1-ACETOXYEUGENOL ACETATE DAN GALANAL B SENYAWA *Alpinia purpurata* K.Schum TERHADAP

Salmonella typhi

ANTIBACTERIAL POTENTIAL OF 1-ACETOXYEUGENOL ACETATE AND GALANAL B COMPOUNDS OF *Alpinia purpurata* K.Schum AGAINST

Salmonella typhi

Rachma Widhiastuti^{1*}, Indah Rakhmawati Afrida², Ali Usman³

^{*)}Corresponding Author

FKIP Biologi Universitas Muhammadiyah Jember

Email : rachmawidhi1@gmail.com

ABSTRAK

Antibakteri adalah suatu zat yang dapat menekan pertumbuhan atau reproduksi bakteri. Antibakteri dapat digolongkan sebagai antimikroba yang dapat menghambat pertumbuhan bakteri. Laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) adalah tanaman herbal yang memiliki kandungan sebagai antibakteri. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi antibakteri yang terkandung dalam laos merah dalam mengatasi bakteri *Salmonella typhi*. Metode yang dilakukan dalam penelitian ini menggunakan metode *in silico* dengan melakukan analisis senyawa dan proses *docking*. Senyawa *1-Acetoxyeugenol acetate* dan *Galanal B* memiliki energi ikat yang kuat dan stabil ikatannya dengan hasil uji senyawa *1-Acetoxyeugenol acetate* -225,44 cal/mol dengan mengikat residu asam amino LEU₄. Senyawa *Galanal B* memiliki energi ikat sebesar -232,38 dengan empat residu asam amino yaitu LEU₁₆₂, PRO₂₃, GLU₂₉, THR₂ penelitian ini dapat dikembangkan untuk formulasi obat sebagai kandidat obat antibakteri dengan mempertimbangan keamanan senyawa dalam kondisi klinis.

Kata Kunci : Acetoxyeugenol acetate, *Alpinia purpurata*, 1- Galanal B, Antibakteri, *Salmonella typhi*.

ABSTRACT

Antibacterial is a substance that can suppress the growth or reproduction of bacteria. Antibacterials can be classified as antimicrobials which can inhibit the growth of bacteria. Red laos (*Alpinia purpurata* K.Schum) is a herbal plant that has antibacterial properties. This research aims to determine the antibacterial potential contained in red laos in dealing with *Salmonella typhi* bacteria. The method used in this research uses the *in silico* method by carrying out compound analysis and a docking process. The compounds *1-Acetoxyeugenol acetate* and *Galanal B* have strong and stable binding energies with test results for the compound *1-Acetoxyeugenol acetate* -225.44 cal/mol by binding to the LEU₄ amino acid residue. The *Galanal B* compound has a binding energy of -232.38 with four amino acid residues, namely LEU₁₆₂, PRO₂₃, GLU₂₉, THR₂. This research can be developed for drug formulation as an antibacterial drug candidate by considering the safety of the compound in clinical conditions.

Keywords : Acetoxyeugenol acetate, *Alpinia purpurata*, 1- Galanal B, Antibacteria, *Salmonella typhi*.

PENDAHULUAN

Di negara yang beriklim tropis seperti Indonesia ditemukan berbagai macam penyakit yang ditimbulkan oleh mikroba, terutama penyakit infeksi yang disebabkan oleh bakteri. Iklim tropis ini ditandai oleh suhu tinggi, kelembaban tinggi, serta curah hujan yang cukup di sepanjang tahun. Kondisi seperti ini menciptakan lingkungan yang sangat mendukung pertumbuhan mikroba. Salah satu bakteri yang dapat menyebabkan penyakit pada manusia adalah *Salmonella typhi* yang dapat menyebabkan penyakit tipus, bakteri ini dapat menyebabkan demam typhoid kemudian timbul gejala demam, sakit kepala, malaise, dan diare (Ladyani & Zahra, 2018). Penyakit ini merupakan infeksi usus yang disebabkan oleh *S. typhi* yang dikonsumsi melalui makanan dan minuman. *Salmonella typhi* dapat bertahan hidup berbulan-bulan hingga satu tahun pada tinja, susu, keju, dan air beku (Imara, 2020).

Dewasa ini banyak masyarakat yang mengkonsumsi obat dengan jangka waktu yang lama. Penggunaan obat kimia dalam jangka waktu yang lama dapat menimbulkan berbagai penyakit berbahaya (Puspariki & Suharti, 2019). Penggunaan obat dalam jangka waktu yang lama sangat berbahaya bagi tubuh. Para ahli meneliti terdapat banyak kandungan senyawa-senyawa baik yang terdapat pada tanaman herbal salah satunya adalah penggunaan herbal ekstrak laos merah. Herbal Laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) merupakan salah satu tanaman dalam family *Zingiberaceae*. Menurut Mubarokah *et al.* (2023) diketahui bahwa ekstrak n-heksan rimpang lengkuas merah mengandung tanin, kuinon, steroid dan triterpenoid, sedangkan dari ekstrak etil-asetat dan etanol 96% rimpang lengkuas merah mengandung senyawa fenol, flavonoid, kuinon, tanin dan juga triterpenoid. Pada Laos merah ini sangat efektif digunakan dalam pengobatan berbagai penyakit termasuk sebagai antibakteri. Oleh karena itu, tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui potensi antibakteri yang terkandung dalam laos merah dalam mengatasi bakteri *Salmonella thypi*.

METODE PENELITIAN

Penelitian ini dilakukan di Universitas Muhammadiyah Jember menggunakan perangkat berupa laptop dengan spesifikasi RAM 8.00 GB dan prosessor intel N100 processor (4 Cores), Storage 512 GB SSD NVMe Gen 3. Perangkat lunak yang digunakan yaitu Pubchem, Hex 8.00, way2drug, Protein Data Bank (PDB), PyRx 0.8, dan BIOVA Discovery dengan protein yang sudah dipreparasi protein dengan ligand, protein tanpa ligand.

Analisis Aktivitas Senyawa : penganalisis melalui situs web dan server Pubchem <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dan <http://way2drug.com/passonline/predict.php>. Mencari

cannonical smile dari senyawa kimia. Senyawa yang telah diunduh dari PDB RCSB berupa *Salmonella thypi* (6WDU) ditampilkan di jendela melalui Protein data bank lalu diunduh, struktur 3 dimensi dalam format file PDB , senyawa air dan faktor pendampingnya harus dihilangkan karena dapat mempengaruhi proses docking dengan ligan uji. Selanjutnya membuka aplikasi BIOVIA Discovery Studio untuk melakukan preparasi dengan menghapus bagian protein yang tidak dibutuhkan seperti *water molecule* dan disisakan reseptor dengan ligand. Selanjutnya disimpan dalam format file PDB. Selanjutnya preparasi protein clean yaitu protein tanpa ligand dan disimpan dalam format PDB, tahap selanjutnya yang dilakukan adalah *Docking* antara senyawa aktif dan protein ligand untuk menemukan hasilnya dengan menggunakan aplikasi Hex 8.00

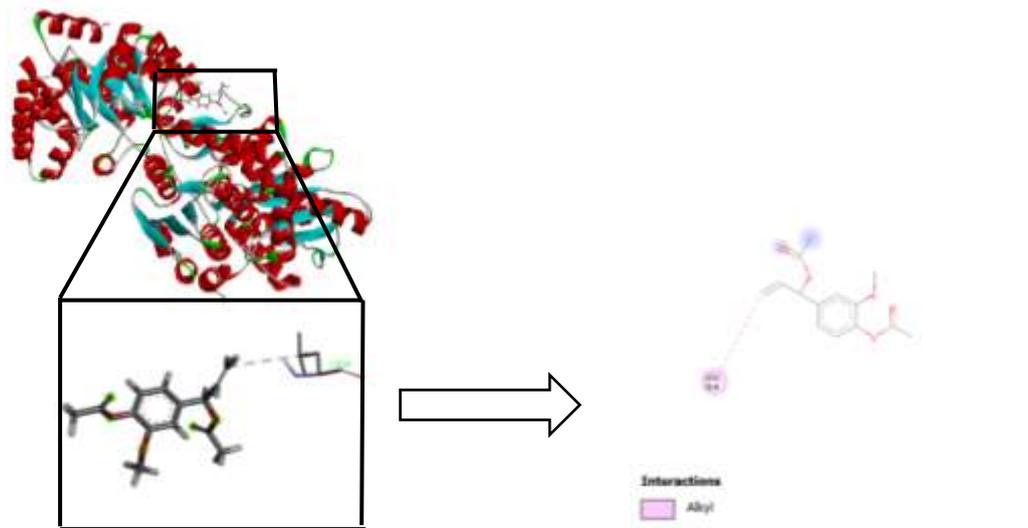
HASIL DAN PEMBAHASAN

Metode *in silico* merupakan metode yang digunakan untuk memprediksi kandungan senyawa yang terdapat pada herbal. Metode ini memerlukan protokol yang telah tervalidasi. Pada senyawa laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) memiliki kandungan senyawa bioaktif yang memiliki potensi sebagai antibakteri seperti pada Tabel 1. berikut:

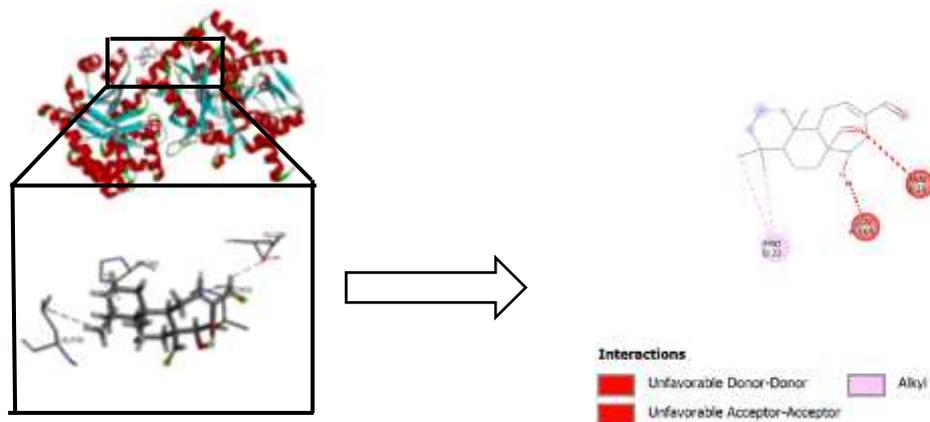
Tabel 1. Interaksi senyawa Laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) dengan *Salmonella thypi*

Interaksi Kompleks	Residu	Kategori	Energy Ikatar
<i>1-Acetoxyeugenol acetate</i>	LEU ₄	Amino acid	-225,44
<i>Galanal B</i>	LEU ₁₆₂ , PRO ₂₃ , GLU ₂₉ , THR ₂ ,	Amino Acid	-232,38

Protein kompleks dari *Salmonella typhi* menunjukkan adanya interaksi residu asam amino dari senyawa *1-Acetoxyeugenol acetate* dan *Galanal B*. Pada senyawa *1-Acetoxyeugenol acetate* didapatkan hasil residu asam amino yaitu LEU₄ dengan energi ikat sebesar -225,44 kal/mol (tabel 1). sedangkan pada senyawa *Galanal B* melibatkan residu asam amino LEU₁₆₂, PRO₂₃, GLU₂₉, THR₂, dengan energi ikat sebesar -232,38 kal/mol (Gambar 1. dan Gambar 2.).



Gambar 1. Interaksi kompleks 1-Acetoxyeugenol acetate_ *S.typhi* dan Visualisasi 2D Acetoxyeugenol acetate_ *S.typhi*



Gambar 2. Interaksi kompleks Galanal B_ *S.typhi* dan Visualisasi 2D Galanal B_ *S.typhi*

Hasil visualisasi 2D dari *docking* senyawa yang ada pada *Alpinia purpurata* K.Schum, dengan menyangkutkan interaksi dari asam amino yang ada dalam *Salmonella typhi* menunjukkan adanya interaksi senyawa. Interaksi senyawa asam amino pada *Alpinia purpurata* dengan asam amino pada *Salmonella typhi* memiliki mekanisme ikatan seperti pada gambar 1 menunjukkan bahwa ligan pembanding dari 1-Acetoxyeugenol acetate memiliki ikatan Alkyl. Ikatan alkyl adalah ikatan radikal univalen yang hanya mengandung atom karbon dan hydrogen yang tersusun menjadi satu rantai ikatan hydrogen. Pada senyawa 1-Acetoxyeugenol acetate memiliki 1 residu asam amino yaitu LEU₄ yang berperan dalam mempengaruhi aktivitas reseptor senyawa dari 1-Acetoxyeugenol acetate. Sedangkan pada senyawa Galanal B memiliki unfavorable-donor yang memiliki 2 residu asam amino yaitu GGN 165 , ASN 26. Selain itu juga

memiliki ikatan alkyl dengan 1 residu asam amino PRO 23 residu asam amino ini juga berperan dalam mempengaruhi aktivitas reseptor senyawa dari *Galanal B*.

Nilai energi ikat sangat mempengaruhi kestabilan interaksi antara ligan dan reseptor. Nilai energi ikat dipilih dari yang paling negatif. Nilai negatif menunjukkan energi terendah yang dibutuhkan reseptor untuk berinteraksi dengan ligan agar dapat terjadi secara spontan. Semakin kecil nilai energi ikat maka interaksi antara ligan dan reseptor semakin stabil. Hasil visualisasi menggambarkan adanya interaksi antara residu asam amino dengan ligan. Adanya keberadaan interaksi ini memungkinkan terjadinya kontak antara ligan dan reseptor 6WDU yang memiliki kontribusi pada aktivitas penghambatan.

Materi genetik memiliki fungsi untuk mewariskan sifat dari satu generasi ke generasi selanjutnya sehingga ada sifat yang dipertahankan oleh leluhurnya. Sifat genetik ini disimpan dalam urutan empat basa yaitu adenin, timin, guanin, dan sitosin yang berada dalam asam nukleat (Santosa, 2023). Banyak gen yang ditemukan dalam suatu bakteri, salah satunya adalah gen penanda *invA*. Gen *invA* adalah suatu gen penanda yang spesifik dan terdapat dalam bakteri *S.typhi* gen ini memiliki suatu ciri yang membuatnya dapat dijadikan gen target untuk identifikasi *S.typhi* yaitu memiliki laju mutasi yang rendah. Gen *invA* ini pada bakteri *S.typhi* terletak pada suatu daerah yang dinamakan dengan *Salmonella Pathogenicity Island (SPI)* yaitu suatu daerah yang memiliki banyak klon *gen invasive* yang menyebabkan bakteri tersebut patogenik (Marcus *et al.*, 2021) Letak gen *invA* pada bakteri *Salmonella typhi* berada pada kromosom penghasil protein yang bisa memberikan sifat *invasif* untuk menginvasi sel epitel pada usus (Santosa, 2023). Menurut penelitian yang dilakukan tercatat bahwa *S.typhi* yang memiliki gen *invA* bersifat lebih *invasive* daripada *S.typhi* yang tidak memiliki gen tersebut. Maka dapat disimpulkan bahwa gen *invA* merupakan faktor virulensi yang penting bagi *S.typhi* (Liwan & Budiarmo, 2019).

SIMPULAN

Berdasarkan penelitian disimpulkan bahwa laos merah (*Alpinia purpurata* K.Schum) memiliki senyawa bioaktif sebagai antibakteri terhadap *Salmonella typhi*. Efektefitas senyawa bioaktif dengan ketentuan memiliki nilai energi ikat tertinggi yaitu *Galanal B* sebesar -232,38 kal/mol. Semakin rendah nilai energi ikat maka semakin kuat dan stabil ikatannya. Oleh karena itu, penelitian ini bisa digunakan sebagai kandidat obat antibakteri dengan mempertimbangkan beberapa keamanan senyawa tersebut dalam hal klinis.

DAFTAR PUSTAKA

- Azmalah, Z., & Fitrianiingsih, P. (2023). *Uji Aktivitas Antibakteri Ekstrak Daun Lengkuas Merah Terhadap Bakteri Penyebab Jerawat*.
- Imara, F. (2020). *Salmonella typhi* Bakteri Penyebab Demam Tifoid. *Prosiding Seminar Nasional Biologi Di Era Pandemi COVID-19*, 6(1), 1–5. <http://journal.uin-alauddin.ac.id/index.php/psb/>.
- Liwan, S. Y., & Budiarmo, T. Y. (2019). Monitoring of Pollution of *Salmonella* sp. in Raw Milk Using Virulence Gen Marker. *Indonesian Food and Nutrition Progress*, 15(2), 54. <https://doi.org/10.22146/ifnp.3382>.
- Mubarokah, A., Kurniawan, & Kusumaningtyas, N. M. (2023). Penetapan Kadar Senyawa Flavonoid Ekstrak Etanol 96%, Metanol 96%, Etil Asetat 96% Rimpang Lengkuas Merah (*Alpinia Purpurata* K.Schum) Dengan Spektrofotometri Uv-Vis. *Jurnal Ilmiah Global Farmasi (JIGF)*, 1(1), 01–08. <https://Jurnal.Iaisragen.Org/Index.Php/Jigf/Article/View/1>.
- Marcus, S. L., Brumell, J. H., Pfeifer, C. G., & Finlay, B. B. (2021). *Salmonella* pathogenicity islands: Big virulence in small packages. *Microbes and Infection*, 2(2), 145–156. [https://doi.org/10.1016/S1286-4579\(00\)00273-2](https://doi.org/10.1016/S1286-4579(00)00273-2).
- Nabilah, R. (2022). Studi in silico Aktivitas Antibakteri Senyawa Golongan Gingerol dan Shogol Jahe Merah (*Zingiber Officinale* Var . *Rubrum*) Terhadap Reseptor Oleh : ROFIFAH NABILAH. *Skripsi Program Studi Farmasi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang*, 128.
- Nurrosyidah, I. H., Hermawati, R., Asri, M., Tri, □, Sudarwati, P. L., & Suryandari, M. (2019). Articles Uji Aktivitas Antibakteri Sediaan Gel Ekstrak Etanol Pegagan (*Centella Asiatica* L.) Terhadap Bakteri *Staphylococcus Aureus* Secara In Vitro Aktivitas Antibakteri Daun Pepaya (*Carica Pepaya*) Menggunakan Pelarut Etanol Terhadap Bakteri *Escherichia Coli*. *Journal Of Pharmaceutical Care Anwar Medika (J-Pham)*, 1(2).
- Puspitasari, E. D., & Purbosari, P. P. (2021). Karakteristik Bahan Ajar Pengembangan Praktikum Biologi Sma. *BIOEDUKASI (Jurnal Pendidikan Biologi)*, 12(2), 141. <https://Doi.Org/10.24127/Bioedukasi.V12i2.4439>.

- Puasa, N. S., Fatimawali, F., & Wiyono, W. (2019). Uji Aktivitas Antibakteri Akstrak Rimpang Lengkuas Merah (*Alpinia Purpurata* K. Schum) Terhadap Bakteri *Klebsiella Pneumonia* Isolat Urine Pada Penderita Infeksi Saluran Kemih. *Pharmakon*, 8(4), 982.
- Putra, M. D. H., Putri, R. M. S., Oktavia, Y., & Ilhamdy, A. F. (2020). Karakteristik Asam Amino dan Asam Lemak Bekasam Kerang Bulu (*Anadara antiquate*) di desa Benan Kabupaten Lingga. *Marinade*, 3(02), 159–167.
- Ramadhani, M., Isnayanti, D., & Mourisa, C. (2022). Edukasi Kesehatan Tentang Penyakit Demam Tifoid Pada Anak MDTA Ar-Ridha. *JURNAL PRODIKMAS Hasil Pengabdian Kepada Masyarakat*, 7(1).
- Seko, M., Sabuna, A. C., & Ngginak, J. (2021). Ajeran Leaves Ethanol Extract (*Bidens pilosa* L) as an Antibacterial *Staphylococcus aureus*. *Jurnal Biosains*, 7(1), 1. <https://doi.org/10.24114/Jbio.V7i1.2267>.
- Santosa, V. (2023). *Deteksi Gen InvA dan Uji Resistensi Antibiotik pada Isolat Indigenus Salmonella typhi Skripsi Deteksi Gen InvA dan Uji Resistensi Antibiotik pada Isolat Indigenus Salmonella typhi*.
- Tifoid, D., Klinis, M., & Dan, P. T. (2020). *Demam tifoid : manifestasi klinis, pilihan terapi dan pandangan dalam islam*. 3(1), 10–16.
- Vivien Pitriani, N. R., Desy Wahyuni, I. G. A., & Bali Sastrawan, I. K. (2023). Pengembangan Media Poster Berbasis Pictorial Riddle Model 4D Sebagai Bahan Ajar Mata Kuliah Pendidikan Agama Program Studi Pendidikan Agama Hindu. *Cetta: Jurnal Ilmu Pendidikan*, 6(1), 135–150. <https://doi.org/10.37329/cetta.v6i1.2027>.