
ANALISIS EKSTRAK KULIT NANAS (ANANAS COMOSUS L.) SEBAGAI ANTIBAKTERI STREPTOCOCCUS MUTANS SECARA IN SILICO

Achmad Fayyadh

SMA Negeri 1 Lhokseumawe, Indonesia

Email: fayadhachmad@gmail.com

ABSTRAK

Kasus karies gigi menjadi permasalahan yang terus meningkat pada pasien dewasa dan anak-anak yang salah satu penyebabnya adalah bakteri *Streptococcus mutans*. Kulit nanas (*Ananas comosus* L.) merupakan bagian tanaman yang telah diketahui memiliki aktivitas sebagai antibakteri karena adanya kandungan metabolit sekunder *epicatechin* dan *quercetin*. Akan tetapi, eksplorasi kulit nanas sebagai antibakteri belum banyak dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengekstraksi kulit nanas, melakukan analisis profil fitokimia ekstrak, dan menguji aktivitas antibakteri ekstrak kulit nanas pada *Streptococcus mutans* melalui molecular docking pada target protein karies gigi. Metode ekstraksi dilakukan dengan maserasi pelarut etanol 70% kemudian hasil ekstrak dilakukan pengujian skrining fitokimia secara kualitatif. Pengujian aktivitas antibakteri secara *In Silico* dilakukan dengan *molecular docking* pada protein Ag I/II dan GbpC. Hasil maserasi didapatkan rendemen ekstrak kulit nanas 6,88%. Ekstrak secara kualitatif positif mengandung alkaloid, saponin, flavonoid, kuinon, polifenol, dan triterpenoid. Hasil pengujian antibakteri secara *in silico* menunjukkan *epicatechin* sebagai penghambat protein Ag I/II dan *quercetin* sebagai penghambat protein GbpC terbaik.

Kata Kunci: antibakteri; ekstrak kulit nana; *streptococcus mutans*

ABSTRACT

Dental caries cases are an increasing problem in adult and child patients, one of the causes of which is *Streptococcus mutans* bacteria. Pineapple peel (*Ananas comosus* L.) is a part of the plant that has been known to have antibacterial activity due to the content of secondary metabolites *epicatechin* and *quercetin*. However, exploration of pineapple peel as an antibacterial has not been widely carried out. This study aims to extract pineapple peel, analyze the phytochemical profile of the extract, and test the antibacterial activity of pineapple peel extract on *Streptococcus mutans* through molecular docking on the target protein of dental caries. The extraction method was carried out using a 70% ethanol solvent, and the resulting extract was then subjected to qualitative phytochemical screening tests. *In Silico* antibacterial activity testing was carried out by molecular docking on Ag I/II and GbpC proteins. The maceration results obtained a pineapple peel extract yield of 6.88%. The extract qualitatively contained alkaloids, saponins, flavonoids, quinones, polyphenols, and triterpenoids. The results of *in silico* antibacterial testing showed that *epicatechin* was the most effective inhibitor of Ag I/II protein, and *quercetin* was the most effective inhibitor of GbpC protein.

Keywords: antibacterial; pineapple peel extract; *streptococcus mutans*

INTRODUCTION

Kesehatan merupakan salah satu aspek yang berperan penting dalam kehidupan, sehingga harus dijaga dan dirawat secara berkala. Terutama kesehatan gigi dan mulut yang jika diabaikan maka akan menimbulkan ragam penyakit, salah satunya karies gigi. Menurut Laporan Status Kesehatan Gigi dan Mulut Global WHO (Organization, 2023) diperkirakan 2

miliar orang menderita karies gigi permanen, dan 514 juta anak menderita karies gigi primer. Hal ini juga didasarkan data dari WHO, karies gigi di negara-negara Eropa, Amerika, Asia, termasuk Indonesia, prevalensinya mencapai 80 - 90% dari anak-anak di bawah umur 18 tahun yaitu 6-12 tahun terserang karies gigi. Anak usia sekolah diseluruh dunia diperkirakan 90% pernah menderita karies (Zaveret al., 2022). Karies merupakan kerusakan pada lapisan gigi yang disebabkan lingkungan asam yang dihasilkan mikroorganisme fermentatif sebagai produk dari metabolisme karbohidrat. Hasil fermentasi karbohidrat akan menghasilkan asam organik, seperti asam laktat, asam asetat, dan propionat yang menurunkan pH hingga angka kritis (5,2 - 5,7). Hal ini mendukung kolonisasi mikroorganisme yang toleran sekaligus penghasil asam. Beberapa penelitian telah membahas mikrobiota karies gigi yang menginfeksi, dimana salah satunya adalah *Streptococcus mutans* (Lager, 2014). Secara medis, infeksi *Streptococcus mutans* dapat dihambat melalui pemberian antibiotik. Namun bersumber dari penelitian uji bakteri *Streptococcus mutans* terhadap antibiotik penderita karies gigi, didapatkan hasil berupa sifat yang resisten terhadap antibiotik (Borty et al., 2015). Oleh karena itu, diperlukan alternatif terhadap resistensi melalui pengobatan antibiotik lain, termasuk antibiotik herbal yang berasal dari tumbuhan.

Indonesia merupakan salah satu negara megabiodeversity, hal ini dibuktikan sebanyak 15.000 tumbuhan Indonesia berpotensi menjadi obat berkhasiat (Jamiliya, 2025). Diantara pemanfaatan tumbuhan sebagai obat herbal berasal dari bagian kulit buah yang sering menjadi limbah organik seperti kulit nanas. Terdapat sekitar 596.000 ton per tahun limbah kulit nanas yang dibuang begitu saja (Suarni, 2023). Buah nanas (*Ananas comosus* L.) mengandung vitamin A dan C, kalsium, fosfor, magnesium, natrium, kalium dan enzim bromelain (Damogalad et al., 2013). Simplisia kulit buah nanas yang merupakan ekstrak etanol dan sari air kulit buah nanas mengandung senyawa antibiotik alkaloid, flavonoida, tanin, saponin, steroid/triterpenoida dan glikosida. Berdasarkan penelitian Irawati, (2022), ekstrak kulit nanas yang mengandung enzim bromelain dan metabolit sekunder dapat bertindak sebagai antibiotik dalam menghambat pertumbuhan bakteri *Streptococcus mutans*. Ekstrak kulit nanas (*Ananas comosus*) yang dibuat dalam konsentrasi 100%, 75%, 50%, dan 25% diuji terhadap *Streptococcus mutans*. Penelitian tersebut menunjukkan hasil Kadar Hambat Minimal (KHM) *Streptococcus mutans* terdapat pada konsentrasi 25% dengan diameter zona hambat sebesar 11,01 mm yang termasuk dalam kategori kuat (Annisa, 2015)

Berdasarkan hal tersebut, penelitian ingin memaksimalkan prinsip Green Chemistry dalam menangani limbah kulit nanas melalui pemanfaatan senyawa antioksidan. Sehingga dapat dijadikan inovasi sebagai alternatif antibiotik berbasis herbal dalam mengatasi karies gigi. Terutama pemanfaatan kulit nanas subang (*Ananas comosus* L. Ceyenne) yang didasarkan pada penentuan protein total ekstrak enzim bromelin yang menghasilkan 44.43%, nilai yang terbilang tinggi karena enzim bromelin tersusun atas protein-protein cukup banyak (F Nuraeni, 2021). Bahkan, berdasarkan hasil uji fitokimia LC/MS-MS ekstrak etanol kulit nanas secara kuantitatif mengandung enam senyawa polifenol yang terdiri dari empat asam fenolik (gallic acid, catechin, epicatechin, ferulic acid) dan dua flavonoid (quercetin, dan kaempferol) (Jatav et al., 2022). Senyawa aktif pada metabolit sekunder mampu memecah ikatan disulfida yang menghubungkan antar polipeptida protein dinding sel dan membran sel. Oleh karena itu,

peneliti mencoba menganalisis hasil ekstrak kulit nanas varietas subang menjadi antibakteri *Streptococcus mutans* secara *In Silico*.

METODE PENELITIAN

Tempat Penelitian

Penelitian dilakukan di Laboratorium SMA Negeri 1 Lhokseumawe dan Laboratorium Kimia FKIP Universitas Syiah Kuala.

Teknik Pengumpulan data

Metode pengumpulan data yang digunakan dalam penelitian ini yaitu studi pustaka, observasi, eksperimental laboratorium dan dokumentasi. Studi pustaka dilakukan dengan mengkaji literatur, buku dan jurnal penelitian nasional dan internasional yang relevan terhadap permasalahan yang dibahas dalam penelitian ini. Metode observasi dilakukan dengan cara pengamatan, pengambilan sampel secara langsung dan mencatat gejala-gejala secara keseluruhan yang terjadi pada objek penelitian, serta mengamati hasil pemeriksaan uji laboratorium. Metode dokumentasi dilakukan dengan pengambilan gambar secara pribadi, pengumpulan data dari berbagai sumber dokumen yang berasal dari internet, yang dilakukan dari awal penelitian hingga penelitian selesai.

Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini yaitu oven, blender, toples kaca, neraca digital, pipet tetes, kertas saring, autoklaf, termometer, kompor listrik, bejana, corong kaca, batang pengaduk, gelas baker, gelas ukur, pinset steril, dan tabung reaksi. Bahan yang digunakan yaitu kulit nanas. Bahan kimia yang digunakan yaitu etanol 70%, reagen dragendroff, reagen mayer, reagen wagner, air panas, aquades, propanol, HCl, NaOH, amonia 10%, klorofom, HCl, H₂SO₄, gelatin, FeCl₃, dan lieberman burchardat. Menggunakan perangkat lunak AutoDockTool versi 1.5.6 dan Discovery Studio 2021.

Rancangan dan Prosedur Penelitian

1) Tahap Maserasi

Maserasi dilakukan dengan melarutkan simplisia kulit nanas menggunakan pelarut etanol 70% pada perbandingan 1 : 10. Sebanyak 500 gr simplisia kulit nanas dilarutkan 2.500 ml etanol 70% di dalam bejana. Kemudian bejana ditutup rapat dan diletakkan di tempat yang tidak terkena cahaya matahari pada suhu kamar. Maserat didiamkan selama 3 × 24 jam, dengan mengaduknya tiap 1 × 24 jam menggunakan batang pengaduk selama 5 menit. Selanjutnya pada simplisia yang sama dilakukan re-maserasi menggunakan 100 gr simplisia yang dilarutkan dengan 500 ml etanol 70%. Kemudian didiamkan selama 3 × 24 jam, dengan mengaduknya tiap 1 × 24 jam menggunakan batang pengaduk selama 5 menit. Hasil maserasi dan re-maserasi selanjutnya disaring menggunakan kertas saring Gater F-802, sehingga menghasilkan filtrat cair ekstrak kulit nanas. Kemudian, filtrat cair ekstrak kulit nanas diuapkan menggunakan metode *water bath* pada suhu 60°C – 70°C . Proses penguapan yang dilakukan akan menghasilkan ekstrak kental kulit nanas yang terpisah dari pelarutnya (Reiza et al., 2019). Perhitungan rendemen dilakukan untuk mengetahui presentase ekstrak kental yang didapat setelah penguapan. Rumus yang digunakan, yaitu:

$$\%Rendemen = \frac{\text{massa ekstrak yang didapat (gram)}}{\text{massa ekstrak awal (gram)}} \times 100\%$$

2) Identifikasi Profil Fitokimia

Identifikasi profil fitokimia ekstrak dilakukan di Laboratorium Kimia FKIP Universitas Syiah Kuala dengan menggunakan metode skrining fitokimia kualitatif. Senyawa yang akan diamati berupa alkaloid, saponin, flavonoid, polifenol, kuinon, tannin, triterpenoid dan steroid. Identifikasi alkaloid dilakukan melalui penambahan reagen dragendorff, reagen mayer, dan reagen wagner pada larutan ekstrak. Sedangkan identifikasi saponin dilakukan dengan menambahkan air yang sudah dipanaskan ke dalam beberapa ml ekstrak lalu dikocok secara vertikal. Kemudian, identifikasi flavonoid dilakukan dengan penambahan sedikit propanol dan HCl kedalam beberapa ml ekstrak. Selanjutnya, identifikasi polifenol dilakukan dengan penambahan beberapa tetes larutan FeCl_3 5% ke dalam ekstrak kemudian dikocok dengan kuat. Pada kuinon, identifikasi dapat dilakukan dengan menyiapkan beberapa ml ekstrak yang ditambahkan 1 ml larutan NaOH. Kemudian, dilanjutkan identifikasi tannin melalui tes gelatin dengan melarutkan beberapa ml ekstrak menggunakan aquades lalu ditambahkan 1% gelatin. Berikutnya pengujian steroid dan triterpenoid dilakukan dengan menyiapkan beberapa ml ekstrak yang sudah bebas air dan ditambahkan lieberman Burchard(Reiza et al., 2019).

3) *Molecular docking*

Tahap ini melibatkan isolasi protein yang diperoleh dari RCSB PDB kemudian diproses untuk mendapatkan ligan dan reseptor. Preparasi reseptor dilakukan dengan menghilangkan struktur ligan, komponen air, penambahan muatan hidrogen polar, perbaikan atom yang hilang, dan penambahan muatan Kollman. Preparasi ligan dilakukan dengan menambahkan muatan gasteiger, pengaturan merge non polar, dan torsion tree. Hasil preparasi reseptor dan ligan disimpan dalam format (*.pdb). Selanjutnya pada tahap validasi dilakukan dengan menyusun grid box yang digunakan untuk menentukan *binding side* yang akan didockingkan. Sehingga akan diperoleh dimensi grid box, spasi amstrong serta koordinat ligan-reseptor protein. Hasil validasi docking yang diperoleh adalah nilai *binding affinity*, konstanta penghambat (K_i) dan RMSD (*Root Mean Square Deviation*). Parameter docking diatur menggunakan parameter Genetic Algorithm (GA) dengan run GA sebanyak 10 kali interaksi disertai pengaturan parameter secara default disimpan berdasarkan pengaturan Lamarckian GA. Semua ligan dari senyawa uji didocking menggunakan metodologi yang sama layaknya validasi dengan mempertahankan dimensi grid box dan posisi yang sama. Hasil docking dianalisis menggunakan AutoDockTools yang menghasilkan parameter *binding affinity*, konstanta penghambat (K_i), dan interaksi ligan-reseptor. Simulasi docking dilakukan menggunakan software AutoDock 4 yang dikonfigurasi oleh AutoDockTools dan dijalankan oleh Comman Prompt. Visualisasi interaksi ligan-reseptor diperoleh menggunakan Discovery Studio 2021 melalui ikatan hidrogen maupun hidrofob (Wicaksana et al., 2024).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Ekstraksi dan profil fitokimia ekstrak kulit nanas

1) Ekstraksi Kulit Nanas

Ekstraksi metode maserasi dilakukan dengan melarutkan simplisia kulit nanas menggunakan pelarut etanol 70% pada perbandingan 1 : 10. Sebanyak 500 gr simplisia kulit nanas dilarutkan 2.500 ml pelarut etanol, dan didiamkan selama 3×24 jam. Hasil maserasi kemudian di saring menggunakan kertas Gater F-802 sehingga didapat ekstrak cair sebanyak 2.000 ml. Selanjutnya proses remaserasi dilakukan dengan melarutkannya 200 gr simplisia yang sama dengan 1000 ml pelarut etanol 70%. Kemudian didiamkan selama 3×24 jam dan disaring kembali sehingga diperoleh ekstrak cair hasil remaserasi sebanyak 840 ml. Ekstrak

cair hasil maserasi dan remaserasi kemudian diuapkan dengan metode *waterbath*. Dengan demikian, diperoleh ekstrak kental sebanyak 34,4 gram dengan persentase rendemen 6,88 % yang dapat dilihat pada (Gambar 1).



(A)



(B)

Pengujian	Nama Reagen	Hasil	Keterangan
Alkaloid	Dragendorff	+	Terbentuk Endapan Coklat Jingga
	Mayer	+	Terbentuk Putih Keruh
	Wagner	+	Terbentuk Warna Kemerahan
Saponin	HCl	+	Terbentuk Gelembung
Tanin	Gelatin	-	Tidak Terbentuk Larutan Putih Keruh
Flavonoid	HCl + Propanol	+	Terbentuk Larutan Kuning
Kuinon	NaOH	+	Terbentuk Larutan Merah
Polifenol	FeCl ₃	+	Terbentuk Larutan Biru
Steroid	Lieberman Burchard	-	Tidak Terbentuk Warna Hijau
Triterpenoid	Lieberman Burchard	+	Terbentuk Warna Merah

Gambar 1. (A)Kulit nanas, dan (B) Ekstrak kulit nanas

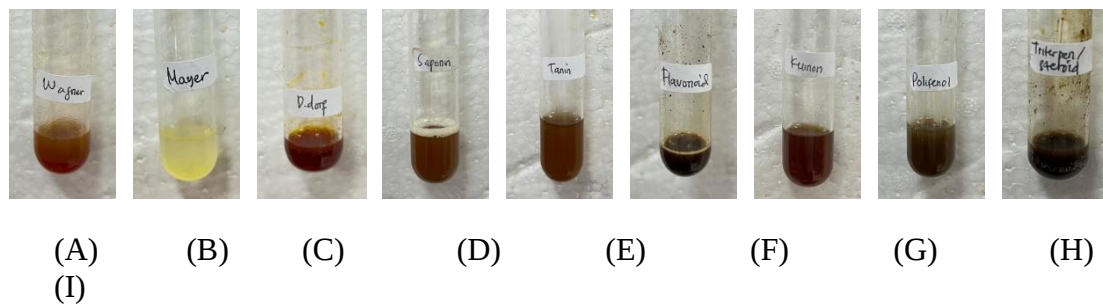
2) Identifikasi Profil Fitokimia

Tabel 1. Hasil Identifikasi Fitokimia

Sumber: data diperoleh

Identifikasi alkaloid dilakukan menggunakan reagen mayer, reagen dragendorff dan reagen wagner. Pada reagen mayer menunjukkan hasil positif dengan terbentuknya larutan putih keruh. Pada reagen dragendorff menunjukkan hasil positif dengan terbentuk larutan endapan coklat jingga, serta pada reagen wagner yang menunjukkan hasil positif dengan terbentuknya larutan berwarna kemerahan. Identifikasi saponin menunjukkan hasil positif dengan terbentuknya gelembung atau busa pada permukaan sampel. Hasil yang diperoleh dari identifikasi tanin menunjukkan hasil negatif dengan tidak terbentuk larutan putih keruh. Identifikasi flavonoid menunjukkan hasil positif dengan terbentuk larutan kuning. Identifikasi kuinon menunjukkan hasil positif dengan terbentuk larutan merah. Identifikasi Polifenol menunjukkan hasil positif dengan terbentuk larutan biru. Identifikasi steroid dan triterpenoid pada reagen lieberman burchard terbentuk larutan berwarna merah yang menghasilkan positif triterpenoid dan menunjukkan hasil negatif steroid dengan tidak terbentuk larutan warna hijau. Sehingga diperoleh hasil identifikasi fitokimia ekstrak kulit nanas secara kualitatif ekstrak kulit nanas positif mengandung senyawa alkaloid, saponin, flavonoid, kuinon, polifenol, dan

triterpenoid. Namun, ekstrak kulit nanas negatif mengandung senyawa tanin dan steroid. Berikut ini merupakan hasil identifikasi fitokimia pada (Tabel 1) dan (Gambar 2).



Gambar 2. Identifikasi Fitokimia (A) Alkaloid Reagen Wagner (B) Alkaloid Reagen Mayer (C) Alkaloid Reagen Dragendorff (D) Saponin (E) Tanin (F) Flavonoid (G) Kuinon (H) Polifenol (I) Steroid & Triterpenoid

Hasil identifikasi fitokimia ekstrak kulit nanas yang diperoleh bahkan lebih baik dari riset yang dilakukan peneliti sebelumnya. Berdasarkan hasil penelitian skrining fitokimia secara kualitatif ekstrak etanol kulit nanas positif mengandung senyawa metabolit sekunder flavonoid, alkaloid, tanin, dan saponin, serta hasil negatif mengandung senyawa sekunder fenolik, steroid, dan triterpenoid (Reiza et al., 2019). Meskipun demikian, identifikasi memperoleh hasil negatif senyawa tanin dan steroid. Hal tersebut dikarenakan metode maserasi dipengaruhi oleh suhu, waktu dan jenis pelarut yang digunakan, penggunaan suhu dan waktu yang terlalu lama menyebabkan rendahnya kadar tanin yang dihasilkan (Kasim et al., 2020). Disamping itu, identifikasi steroid juga memperoleh hasil negatif karena penggunaan pelarut etanol 70% yang bersifat polar. Sedangkan senyawa steroid merupakan senyawa yang bersifat nonpolar sehingga tidak dapat terekstrak dengan sempurna pada pelarut tersebut (Kimia, 2014). Identifikasi fitokimia tersebut memperoleh hasil positif polifenol, sejalan dengan riset yang dilakukan sebelumnya. Hasil uji fitokimia LC/MS-MS ekstrak etanol kulit nanas secara kuantitatif mengandung enam senyawa polifenol yang terdiri dari empat asam fenolik (*gallic acid*, *catechin*, *epicatechin*, *ferulic acid*) dan dua flavonoid (*quercetin*, dan *kaempferol*) (Jatav et al., 2022).

Evektifitas Ekstrak Kulit Nanas terhadap Aktivitas Antibakteri *Streptococcus mutans* Secara *In Silico*

1) Tahap validasi

Validasi dilakukan pada protein Ag I/II (Antigen I/II) dengan ID: 3IPK dan GbpC (Glucan Binding Protein C) dengan ID: 6CAM. Pemilihan ligan berdasarkan hasil preparasi dari protein sehingga diperoleh ligan *phenylmethanol sulfonat acid* (PMS) dari Ag I/II dan ligan *beta-D-glucopyranose* (BGC) dari GbpC. Ligan dan reseptor dari kedua protein divalidasi dengan pengaturan dimensi grid box (X: 40, Y: 40, Z: 40) dan spasi grid (0,375 Å) pada koordinat Ag I/II (X: 6.787, Y: 40.372, Z: 22.711) dan GbpC (X: 241.316, Y: -26.092, Z: 7.265). Maka dari validasi tersebut didapatkan hasil *binding affinity* ligan-reseptor Ag I/II sebesar -4,96 kcal/mol dengan RMSD senilai 1,042 Å. Sedangkan GbpC diperoleh nilai *binding affinity* sebesar -5,87 kcal/mol dengan RMSD senilai 0,953 Å. Hasil validasi kedua

protein memperoleh $\text{RMSD} \leq 2 \text{ \AA}$ yang memenuhi ketentuan validasi. Pengaturan dan hasil validasi metode *molecular docking* terdapat pada (Tabel 2).

Tabel 2. Hasil validasi *molecular docking* dengan protein AgI/II dan GbpC

Parameter	Ag I/II	GbpC
PDB ID	3IPK	6CAM
ID Co-crystal Ligan	PMS	BGC
Ligan Name	<i>Phenylmethanol sulfonat acid</i>	<i>beta-D-glucopyranose</i>
Grid Box Size	40 x 40 x 40	40 x 40 x 40
Grid Box Coordinate (x, y, z)	6.787	241.316
	40.372	-26.092
	22.711	7.265
Grid Spacing	0.375	0.375
RMSD (Å)	1,042	0,953
<i>Binding affinity</i> (kcal/mol)	-4,96	-5,87

Sumber: data diperoleh

2) *Molecular docking*

Docking dilakukan untuk mencari senyawa yang berpotensi menjadi kandidat penghambat protein melalui hasil analisis terhadap nilai *binding affinity* dan konstanta penghambat serta kesamaan interaksi asam amino dari *ligan native*. Senyawa yang dipilih diperoleh dari hasil uji fitokimia ekstrak etanol kulit nanas. Hasil uji fitokimia LC/MS-MS ekstrak etanol kulit nanas secara kuantitatif mengandung enam senyawa polifenol yang terdiri dari empat asam fenolik (*gallic acid*, *catechin*, *epicatechin*, *ferulic acid*) dan dua flavonoid (*quercetin*, dan *kaempferol*) (Jatav et al., 2022). Selanjutnya senyawa didocking pada protein Ag I/II dan GbpC dengan pengaturan yang sama dengan hasil validasi, sehingga hasil *molecular docking* yang diperoleh terdapat pada (Tabel 3).

Tabel 3. Hasil *molecular docking* senyawa ekstrak etanol kulit nanas terhadap protein Ag I/II dan GbpC

Senyawa	Ag I/II (ID: 3IPK)		GbpC (ID: 6CAM)	
	G(kcal/mol)	Ki(μM)	G(kcal/mol)	Ki(μM)
<i>Catechin</i>	-6.41	19.91	-8.65	0.458
<i>Quercetin</i>	-6.26	25.96	-8.71	0.411
<i>Epicatechin</i>	-7.61	2.66	-8.12	1.12
<i>Ferulic Acid</i>	-4.52	487.94	-5.95	43.63
<i>Gallic Acid</i>	-3.82	1590	-4.76	321.81
<i>Kaempferol</i>	-6.54	16.12	-8.46	0.630
<i>Amoxicillin</i>	-7.59	2.72	-7.73	2.15
<i>Native Ligan</i>	-4.96	230.16	-5.87	49.49

Sumber: data diperoleh

Dari hasil docking diperoleh *epicatechin*, *kaempferol*, *catechin*, dan *quercetin* sebagai senyawa yang memiliki nilai *binding affinity* terhadap reseptor protein Ag I/II yang lebih kecil

dari *ligan native*. Keempat senyawa memiliki nilai *binding affinity* berturut-turut sebesar -7.61 kcal/mol, -6.54 kcal/mol, -6.41 kcal/mol, dan -6.26 kcal/mol. Sedangkan nilai konstanta penghambat berturut-turut sebesar 2.66 μ M, 16.12 μ M, 19.91 μ M, dan 25.96 μ M. Sementara itu, hasil docking pada protein GbpC menunjukkan *quercetin*, *catechin*, *kaempferol*, dan *epicatechin* memiliki nilai *binding affinity* yang lebih kecil dari *ligan native*. Keempat senyawa tersebut memiliki nilai *binding affinity* berturut-turut sebesar -8.71 kcal/mol, -8.65 kcal/mol, -8.46 kcal/mol, dan -8.12 kcal/mol dan nilai konstanta penghambat berturut-turut sebesar 0.411 μ M, 0.458 μ M, 0.630 μ M, dan 1.12 μ M.

Melalui hasil Analisa docking tersebut diperoleh epicatechin memiliki nilai *binding affinity* yang lebih rendah dari pada *ligan native* yang senilai -4.96 kcal/mol. Bahkan lebih rendah dari nilai *binding affinity* Amoxicillin senilai -7.59 kcal/mol. Sementara itu, hasil docking protein GbpC menunjukkan *quercetin* memiliki nilai *binding affinity* yang lebih rendah dari *ligan native* senilai -5.87 kcal/mol. Bahkan lebih rendah dari nilai *binding affinity* amoxicillin senilai -7.73 kcal/mol. Dalam hal ini, skor merupakan parameter kekuatan afinitas pengikatan ligan uji terhadap reseptor. Semakin stabil interaksi ligan-reseptor dicerminkan dengan semakin rendahnya skor (minus). Kestabilan interaksi ini sebanding dengan potensi senyawa dalam memberikan efek yang sama dengan ligan referens (Antiproliferasi) secara virtual (Adelina R. 2014). Maka, dari hasil docking tersebut, epicatechin berpotensi menjadi kandidat penghambat protein Ag I/II dan quercetin juga berpotensi menjadi kandidat penghambat protein GbpC karena tingginya tingkat kestabilan interaksi ligan-reseptor dibandingkan senyawa lainnya.

3) Visualisasi interaksi asam amino

Melalui hasil visualisasi terlihat adanya kesamaan situs pengikatan antara *quercetin*, *ferulic acid*, dan *kaempferol* dengan *ligan native* terhadap reseptor dari protein Ag I/II pada (Tabel 4). *Quercetin* memiliki dua kesamaan situs pengikatan dengan *ligan native* pada asam amino Serin (Ser697) melalui ikatan hidrogen dan pada asam amino Triptofan (Trp816) melalui ikatan hidrofob (van der Waals). Sementara itu, *ferulic acid* juga memiliki dua kesamaan situs pengikatan dengan *ligan native* pada asam amino Arginin (Arg824) dan pada asam amino Triptofan (Trp816) melalui ikatan hidrofob. Sedangkan *kaempferol* memiliki dua kesamaan situs pengikatan dengan *ligan native* pada asam amino Arginin (Arg824), dan Serine (Ser697) melalui ikatan hidrogen. Hasil visualisasi protein GbpC terdapat tiga senyawa yang memiliki situs pengikatan yang sama terhadap *ligan native* yaitu *quercetin*, *gallic acid*, dan *kaempferol* yang terlihat pada (Tabel 5). *Quercetin* dan *kaempferol* memiliki tiga kesamaan situs pengikatan dengan *ligan native* pada asam amino Serin (Ser347), Serin (Ser346), dan Alanin (Ala453) melalui ikatan hidrogen. Sedangkan *gallic acid* memiliki tiga kesamaan situs pengikatan dengan *ligan native* pada asam amino Triptofan (Trp451), Phenylalanine (Phe452), dan Serin (Ser346) melalui ikatan hidrogen.

Tabel 4. Visualisasi interaksi asam amino senyawa ekstrak etanol kulit nanas terhadap protein Ag I/II

No	Identified compound	Hydrogen bonds (H-bonds)	Hydrophobic interaction
1	<i>Catechin</i>	ASP760, THR586, TRP816, GLU706, VAL587	TRP816
2	<i>Quercetin</i>	TRP816, ASP760, SER697 , SER762, VAL586	TRP816
3	<i>Epicatechin</i>	THR586, TRP816, SER697 , ASP760	ASP760
4	<i>Ferulic Acid</i>	THR586, ARG824 , ASP760	TRP816 , VAL587
5	<i>Gallic Acid</i>	ASN820, ARG824 , GLU706, SER818	ALA696
6	<i>Kaempferol</i>	ASP760, ARG824 , SER697 , TRP816	ASP760
7	<i>Amoxicilin antibiotik</i>	TRP816, THR586, ASP760, ARG824	TRP816
8	<i>Native Ligan</i>	ARG824 , SER697	TRP816 , ARG824

Sumber: data diperoleh

Tabel 5. Visualisasi interaksi asam amino senyawa ekstrak etanol kulit nanas terhadap protein GbpC

No	Identified compound	Hydrogen bonds (H-bonds)	Hydrophobic interaction
1	<i>Catechin</i>	GLY414, ALA457, SER344, ASN455, ALA453 , SER346	TRP451, PRO416, SER346
2	<i>Quercetin</i>	ILE190, ASP413, THR300, SER347 , SER346 , ALA453 , ASN455	ALA457, ALA453
3	<i>Epicatechin</i>	TRP451 , GLY414, ASP413, ALA453	SER347, ALA453, GLY414
4	<i>Ferulic Acid</i>	ASP408, ALA453 , TRP451	PHE452, ALA453
5	<i>Gallic Acid</i>	GLY414, ASN455, TRP451 , PHE452 , SER346	ALA453
6	<i>Kaempferol</i>	SER346 , ALA453 , ASN455, SER347 ,	VAL410, ALA453
7	<i>Amoxicilin antibiotik</i>	GLY414, ALA453 , ASP408	TRP451, ALA453
8	<i>Native Ligan</i>	SER346 , PHE452 , SER347 , TRP451 , ALA453	-

Sumber: data diperoleh

Dari hasil visualisasi ikatan asam amino pada protein Ag I/II, maka *kaempferol* merupakan senyawa yang paling banyak memiliki kesamaan jumlah asam amino melalui ikatan hidrogen terhadap *ligan native*. Sementara itu, visualisasi asam amino protein GbpC menunjukkan *quercetin* memiliki interaksi asam amino melalui ikatan hidrogen yang paling

banyak memperoleh kesamaan interaksi asam amino terhadap ligan-reseptor. Dalam hal ini, hasil visualisasi interaksi asam amino pada protein GbpC sejalan dengan hasil dockingnya yang menunjukkan *quercetin* sebagai senyawa yang memiliki ikatan yang paling stabil. Namun, hasil visualisasi asam amino protein Ag I/II menunjukkan senyawa berbeda dibandingkan dengan hasil docking. Tingkat kestabilan interaksi asam amino tidak hanya dinilai dari jumlah asam amino yang sama tetapi banyaknya ikatan hasil interaksi yang terbentuk juga bagian dari parameter. Semakin banyak ikatan hidrogen yang terbentuk dengan residu asam amino, maka ikatan akan semakin kuat dan stabil (Tallei et al., 2020). *Epicatechin* memiliki enam ikatan interaksi dengan asam amino melalui ikatan hidrogen dan dua ikatan hidrofob. Ikatan tersebut lebih stabil karena *quercetin* memiliki lima ikatan hidrogen dan satu ikatan hidrofob. *Kaempferol* memiliki empat ikatan hydrogen dan dua ikatan hidrofob sedangkan ferulic acid memiliki tiga ikatan hydrogen dan dua ikatan hidrofob. Sehingga melalui hasil visualisasi tersebut, *epicatechin* merupakan senyawa yang memiliki interaksi asam amino yang paling kuat terhadap protein Ag I/II, sedangkan *quercetin* merupakan senyawa yang memiliki interaksi asam amino paling kuat terhadap protein GbpC.

KESIMPULAN

Esktrak kulit nanas dengan pelarut etanol 70% positif mengandung metabolit sekunder berupa alkaloid, saponin, flavonoid, kuinon, polifenol, dan triterpenoid. Namun, negatif mengandung metabolit sekunder tannin dan steroid. Hasil molecular docking enam senyawa polifenol yang terdiri dari empat asam fenolik (gallic acid, catechin, epicatechin, ferulic acid) dan dua flavonoid (quercetin dan kaempferol) sebagai penghambat bakteri *Streptococcus mutans* secara in silico. Pada protein Ag I/II menunjukkan senyawa epicatechin sebagai senyawa penghambat protein dengan nilai binding affinity senilai -7.61 kkal/mol. Sedangkan pada protein GbpC menunjukkan senyawa quercetin sebagai senyawa penghambat protein dengan nilai binding affinity senilai -8.71 kkal/mol.

DAFTAR PUSTAKA

- Annisa, A. (2015). *Uji Efektivitas Antibakteri Ekstrak Kulit Nanas (Ananas Comosus. L) Terhadap Pertumbuhan Streptococcus Mutans Penyebab Karies Gigi*. [Http://Scholar.Unand.Ac.Id/118/](http://Scholar.Unand.Ac.Id/118/)
- Borty, S. C., Hafiz, K. M. Bin, Ali, M. M., Begum, K., Ahammed, T., Monir, M. S., & Islam, M. A. (2015). Isolation, Identification And Antibioqram Profile Of Bacteria Isolated From Dental Caries Patients Of Mymensingh District Of Bangladesh. *Asian Journal Of Medical And Biological Research*, 1(2), 244–253. <https://doi.org/10.3329/Ajmb.V1i2.25618>
- Damogalad, V., Edy, H., & Pharmacon, H. S.-. (2013). Formulasi Krim Tabir Surya Ekstrak Kulit Nanas (Ananas Comosus L Merr) Dan Uji In Vitro Nilai Sun Protecting Factor (Spf). *Ejournal.Unsrat.Ac.Idv Damogalad, Hj Edy, Hs Supriatipharmacon, 2013•Ejournal.Unsrat.Ac.Id*. <https://Ejournal.Unsrat.Ac.Id/Index.Php/Pharmacon/Article/Download/1577/1269>
- F Nuraeni, I. M. L. S. (2021). *Kajian Pustaka Karakterisasi Enzim Bromelin Pada Nanas (Ananas Comosus (L.) Merr.) Dari Berbagai Negara Terhadap Pengaruh Suhu Dan Ph*. https://Scholar.Google.Com/Scholar?hl=Id&As_Sdt=0%2c5&Q=Nuraeni%2c+F.%2c+Maulana%2c+I.+T.%2c+%26+Syafnir%2c+L.+%282021%29.+Kajian+Pustaka+Karak

- erisasi+Enzim+Bromelin+Pada+Nanas+%28ananas+Comosus+%28l.%29+Merr.%29+
Dari+Berbagai+Negara+Terhadap+Pengaruh+Suhu+Dan+Ph.+&Btng=
- Irawati. (2022). *Uji Potensi Antibakteri (Staphylococcus Aureus) Dan Toksisitas (Arthemisia Salina Leach) Ekstrak Bromelin Bonggol Nanas (Ananas Comosus L.* <https://Repository.Unhas.Ac.Id/Id/Eprint/32647/>
- Jamiliya, L. (2025). *Obat Pada Masyarakat Kecamatan Guluk-Guluk Kabupaten Sumenep Sebagai Upaya Pengembangan Bahan Ajar Atlas Tumbuhan Obat* <https://Eprints.Umm.Ac.Id/Id/Eprint/14165/>
- Jatav, J., Tarafdar, A., Saravanan, C., & Bhattacharya, B. (2022a). Assessment Of Antioxidant And Antimicrobial Property Of Polyphenol-Rich Chitosan-Pineapple Peel Film. *Journal Of Food Quality*, 2022, 1–10. <https://doi.org/10.1155/2022/8064114>
- Kasim, A., Asben, A., & Anwar, A. (2020). Review: *Optimalisasi Metode Maserasi Untuk Ekstraksi Tanin Rendemen Tinggi.*
- Kimia, P. (2014). *Ergina, Siti Nuryanti Dan Indarini Dwi Pursitasari Uji Kualitatif Senyawa Metabolit Sekunder Pada Daun Palado (Agave Angustifolia) Yang Diekstraksi Dengan Pelarut Air Dan Etanol Qualitative Test Of Secondary Metabolites Compounds In Palado Leaves (Agave Angustifolia) Extracted With Water And Ethanol. *J. Akad. Kim*, 3(3), 165–172.
- Lager, A. H. (2014). *Dentine Caries: Acid Tolerant Microorganisms And Aspects On Collagen Degradation.* <https://www.diva-portal.org/smash/Record.jsf?pid=diva2:1404625>
- Reiza, I. A., Rijai, L., & Mahmudah, F. (2019). Skrining Fitokimia Ekstrak Etanol Kulit Nanas (Ananas Comosus (L.) Merr). *Proceeding Of Mulawarman Pharmaceuticals Conferences*, 10, 104–108. <https://doi.org/10.25026/Mpc.V10i1.371>
- Suarni, S. (2023). *Identifikasi Karakteristik Eco Enzyme Dari Bahan Organik Kulit Buah Dengan Variasi Gula Aren Dan Molases= Identify Eco Enzyme Characteristics Of Fruit Peel.* <https://Repository.Unhas.Ac.Id/Id/Eprint/30413/>
- Tallei, T. E., Tumilaar, S. G., Niode, N. J., Fatimawali, Kepel, B. J., Idroes, R., Effendi, Y., Sakib, S. A., & Emran, T. Bin. (2020). Potential of Plant Bioactive Compounds as Inhibitors of SARS-CoV-2 Main Protease (Mpro) and Spike (S) Glycoprotein: A Molecular Docking Study. *Scientifica*, 2020. <https://doi.org/10.1155/2020/6307457>
- Wicaksana, F., Sofi, F., & Rafly, M. (2024). In Silico Antibacterial Activity Of Polyacrylate Derivatives Against Mycobacterium Tuberculosis And In Vitro Antioxidant Properties From Ethanol Extraction Of Blackjack (Bidens Pilosa L.). *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 27(5), 205–215. <https://doi.org/10.14710/Jksa.27.5.205-215>
- Zavera Adam, A., Ellen Ratuela, J. (2022). Tingkat Pengetahuan Tentang Kebersihan Gigi Dan Mulut Siswa Sekolah Dasar. *Ejournal.Unsrat.Ac.Id* Adam, Je Ratuelaindonesian *Journal of Public Health and Community Medicine*, 2022 • *E-Journal.Unsrat.Ac.Id*, 3. <https://Ejournal.Unsrat.Ac.Id/Index.Php/Ijphcm/Article/View/42516>