

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA EKSTRAK DAUN RAMBUSA  
(*Passiflora foetida* L.) SEBAGAI INHIBITOR PBP2a PADA  
*Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus***

**SKRIPSI**



**Oleh :  
Bayu Giri Nur Seto  
NIM. 22103059**

**PROGRAM STUDI SARJANA FARMASI  
FAKULTAS ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS dr. SOEBANDI  
JEMBER  
2026**

## LEMBAR PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul Studi *In Silico* Senyawa Ekstrak Daun Rambusa (*Passiflora foetida* L.) Sebagai Inhibitor PBP2a Pada *Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus* telah diuji dan disahkan oleh Dekan Fakultas Ilmu Kesehatan pada :

Nama : Bayu Giri Nur Seto

NIM : 22103059

Hari, Tanggal : Selasa, 4 Agustus 2026

Program Studi : Sarjana Farmasi Fakultas Ilmu Kesehatan

Universitas dr. Soebandi

Tim Penguji

Ketua Penguji,



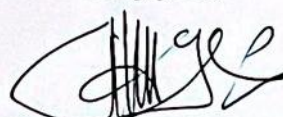
Mohammad Rofik Usman, M.Si  
NIDN. 0705019003

Penguji II,



apt. Sholihatil Hidayati, M.Farm  
NIDN. 0509088601

Penguji III,



apt. Lindawati Setyaningrum, M.Farm  
NIDN. 0703068903

Mengesahkan,

Dekan Fakultas Ilmu Kesehatan,  
Universitas dr. Soebandi



Ai Nur Zannah, S.ST., M.Keb  
NIDN. 0719128902

## Studi *In Silico* Senyawa Ekstrak Daun Rambusa (*Passiflora foetida* L.) Sebagai Inhibitor PBP2a Pada *Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus*

Bayu Giri Nur Seto<sup>1\*</sup>, Lindawati Setyaningrum<sup>2</sup>, Mohammad Rofik Usman<sup>3</sup>, Sholihatil Hidayati<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup> Program Studi Sarjana Farmasi, Fakultas Ilmu Kesehatan, Universitas dr. Soebandi, Jember, Jawa Timur, Indonesia

<sup>1,2,3,4</sup> Bachelor of Pharmacy Program, Faculty of Health Sciences, dr. Soebandi University, Jember, East Java, Indonesia

\*Corresponding Authors: [linda.w.setyaningrum@gmail.com](mailto:linda.w.setyaningrum@gmail.com)

### ABSTRAK

**Latar Belakang :** *Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus* (MRSA) merupakan ancaman kesehatan global akibat resistensinya terhadap sebagian besar antibiotik golongan  $\beta$ -laktam yang dimediasi oleh *Penicillin-Binding Protein 2a* (PBP2a), sementara potensi ekstrak daun rambusa (*Passiflora foetida* L.) sebagai inhibitor PBP2a belum banyak dikaji.

**Tujuan :** Penelitian ini bertujuan mengetahui karakteristik fisikokimia, farmakokinetika, dan toksisitas, serta interaksi senyawa aktif ekstrak daun rambusa (*Passiflora foetida* L.) dengan reseptor PBP2a pada MRSA menggunakan metode *in silico*.

**Metode :** Senyawa hasil LC-HRMS diseleksi dengan Lipinski's Rule of Five, kemudian di *docking* terhadap PBP2a (PDB ID : 4CJN) menggunakan AutoDockTools 1.5.6 dan PyRx 0.9.8, dengan ceftaroline sebagai kontrol positif. Interaksi ligan-reseptor divisualisasikan dengan BIOVIA Discovery Studio 2024, sedangkan profil farmakokinetika dan toksisitas diprediksi menggunakan pkCSM dan Tox-Prediction.

**Hasil :** Dari 554 senyawa hasil LC-HRMS, 283 senyawa memenuhi Lipinski's Rule of Five. Validasi *docking* menghasilkan RMSD 0,86 Å. Virtual skrining menyeleksi enam senyawa terbaik berdasarkan *binding free energy* (BFE) dan kesamaan interaksi residu dengan native ligand/ceftaroline. Hydroxy-Oxoandrostanyl Acetate menunjukkan BFE terbaik (-8,72 kkal/mol), diikuti Alcyopterosin C (-7,71 kkal/mol), keduanya melampaui ceftaroline (-7,67 kkal/mol), sedangkan Scytoscalarol (-7,51 kkal/mol) setara dengan native ligand (-7,51 kkal/mol). Keenam senyawa memiliki profil farmakokinetika dan toksisitas yang cukup baik.

**Kesimpulan :** Temuan ini menunjukkan bahwa ekstrak daun rambusa berpotensi sebagai kandidat inhibitor PBP2a pada MRSA, sehingga dapat menjadi dasar pengembangan kandidat antibakteri baru.

**Kata Kunci :** Daun Rambusa, *Molecular Docking*, *Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus* (MRSA), *Penicillin-Binding Protein 2a* (PBP2a).