

**UJI AKTIVITAS ANTIBAKTERI DAN INOVASI FACIAL
WASH EKSTRAK KROKOT (*Portulaca oleracea*)
TERHADAP *Propionibacterium acnes* SECARA
IN SILICO DAN IN VITRO**

SKRIPSI



**Oleh :
Nadhifa Dini Maulida
NIM 22103029**

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

LEMBAR PERSETUJUAN

Hasil penelitian ini telah diperiksa oleh pembimbing dan telah disetujui
untuk mengikuti seminar hasil pada Program Studi Sarjana Farmasi
Universitas dr. Soebandi

Jember, 30 Maret 2026

Pembimbing Utama



Mohammad Rofik Usman, M.Si
NIDN. 0705019003

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi/Laporan Tugas Akhir yang berjudul *Uji Aktivitas Antibakteri dan Inovasi Facial Wash Ekstrak Krokot (Portulaca oleracea) terhadap Propionibacterium acnes Secara In Silico dan In Vitro* telah diuji dan disahkan oleh Dekan Fakultas Ilmu Kesehatan pada:

Nama : Nadhifa Dini Maulida

NIM : 22103029

Hari, Tanggal : Senin, 30 Maret 2026

Program Studi : S1 Farmasi, Universitas dr. Soebandi

Tim Penguji
Ketua Penguji,

Dr. apt. Dyan Wigati, M.Sc.
NIDN. 0611098202

Penguji II,

apt. Sholihatil Hidayati, M.Farm
NIDN. 0509088601

Penguji III,

Mohammad Rofik Usman, M.Si
NIDN. 0705019003

Mengesahkan,

Dekan Fakultas Ilmu Kesehatan,
Universitas dr. Soebandi



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

NIDN. 0719128902

ABSTRAK

Jerawat merupakan masalah kulit yang umum disebabkan oleh infeksi bakteri *Propionibacterium acnes*. Pencarian alternatif terapi dari bahan alam terus dikembangkan karena dinilai lebih aman dibandingkan bahan sintetis. Herba krokot (*Portulaca oleracea* L.) diketahui memiliki kandungan senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antibakteri. Penelitian ini bertujuan mengevaluasi aktivitas antibakteri senyawa ekstrak herba krokot terhadap *P. acnes* secara *in silico* melalui analisis ADMET, validasi docking, dan virtual screening. Dari 69 senyawa yang teridentifikasi, sebanyak 31 memenuhi parameter Lipinski, namun hanya 9 senyawa yang dapat diuji lebih lanjut. Prediksi ADMET menunjukkan mayoritas senyawa memiliki kelarutan baik, permeabilitas usus dan kulit memadai, serta risiko toksisitas rendah. Senyawa *Butylated Hydroxytoluene* menonjol dengan distribusi luas, aman dari efek mutagenik, dan tidak menghambat kanal hERG. Hasil docking memperlihatkan semua senyawa mampu berinteraksi dengan residu penting pada sisi aktif reseptor *Exo-x-sialidase* (PDB ID: 7LBV). *Butylated Hydroxytoluene* menunjukkan energi ikatan terendah (-6,56 kkal/mol), lebih baik dibandingkan kontrol positif klindamisin (-6,17 kkal/mol). Interaksi kuat juga diperlihatkan oleh Isospathulenol dan *Benzaldehyde*, *3-benzyloxy-2-fluoro-4-methoxy-*. Temuan ini mengindikasikan herba krokot berpotensi dikembangkan sebagai kandidat bahan aktif antibakteri terhadap *P. acnes*. Penelitian lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* diperlukan untuk memvalidasi hasil prediksi *in silico* serta menilai potensi penggunaannya dalam formulasi topikal anti jerawat.

Kata kunci: *Portulaca oleracea*, *Propionibacterium acnes*, ADMET, *in silico*, docking molekuler

ABSTRACT

Acne is a common skin disorder primarily caused by Propionibacterium acnes infection. The search for alternative therapies from natural sources has gained attention due to their safety compared to synthetic agents. Purslane (Portulaca oleracea L.) is known to contain bioactive compounds with potential antibacterial activity. This study aimed to evaluate the antibacterial activity of purslane compounds against P. acnes through in silico analysis, including ADMET profiling, docking validation, and virtual screening. From 69 identified compounds, 31 fulfilled Lipinski's rule of five, but only 9 compounds were eligible for further docking analysis. ADMET prediction revealed that most compounds exhibited favorable water solubility, intestinal and skin permeability, and relatively low toxicity risks. Among them, Butylated Hydroxytoluene showed favorable distribution, was non-mutagenic, and did not inhibit hERG channels. Docking results demonstrated that all tested compounds interacted with key residues at the active site of Exo-x-sialidase (PDB ID: 7LBV). Butylated Hydroxytoluene exhibited the lowest binding energy (-6.56 kcal/mol), which was stronger than the positive control clindamycin (-6.17 kcal/mol). Strong interactions were also observed for Isospathulenol and Benzaldehyde, 3-benzyloxy-2-fluoro-4-methoxy-. These findings suggest that purslane compounds hold promise as antibacterial candidates against P. acnes. Further in vitro and in vivo studies are required to validate the in silico predictions and to explore their potential application in topical anti-acne formulations.

Keywords: *Portulaca oleracea*, *Propionibacterium acnes*, ADMET, *in silico*, molecular docking