

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia, sebagai negara maritim, kaya akan potensi sumber daya laut, salah satunya adalah rumput laut *Kappaphycus alvarezii* (*Eucheuma cottonii*). Rumput laut ini dikenal menghasilkan berbagai metabolit sekunder yang memiliki aktivitas biologis, termasuk antioksidan dan antibakteri. Senyawa bioaktif ini berpotensi menjadi kandidat obat baru untuk mengatasi infeksi *C. acnes*. Rumput laut *Kappaphycus alvarezii* merupakan salah satu sumber hayati laut yang diketahui memiliki kandungan metabolit sekunder yang melimpah, seperti sterol, fenol, flavonoid dan terpenoid. Metabolit primer dan sekunder adalah dua kelompok molekul organik yang diproduksi oleh organisme. Perbedaan utama terletak pada fungsi esensialnya bagi kelangsungan hidup. Metabolit primer penting untuk pertumbuhan dan reproduksi, sedangkan metabolit sekunder tidak mutlak diperlukan untuk kelangsungan hidup organisme, tetapi memiliki peran khusus dalam interaksi dengan lingkungan. Senyawa-senyawa ini dikenal memiliki aktivitas biologis, termasuk sebagai antioksidan, antiinflamasi, dan antibakteri. Berdasarkan hasil analisa *Gas Chromatography–Mass Spectrometry* (GC-MS), ekstrak etanol dari *Kappaphycus alvarezii* mengandung berbagai senyawa aktif yang berpotensi sebagai agen antibakteri (Setyawan *et.al.*,2022). Selain itu, menurut Arulkumar *et al.* (2021) menunjukkan bahwa kandungan bioaktif dalam *Kappaphycus alvarezii* menjadikannya bahan potensial dalam produk kosmetik dan farmasi karena peranannya dalam aktivitas fotoprotektif, anti-kerut, serta anti-mikroba.

Penyakit kulit yang paling umum dialami oleh remaja hingga dewasa adalah acne vulgaris (jerawat), yang sering kali berdampak signifikan pada kualitas hidup dan psikologis penderitanya. Etiologi utama jerawat adalah proliferasi bakteri *Cutibacterium acnes* (sebelumnya *Propionibacterium acnes*), yang hidup di unit pilosebacea dan menyebabkan peradangan melalui sekresi enzim dan produksi asam lemak. Pengobatan jerawat secara konvensional sangat bergantung pada antibiotik topikal seperti klindamisin. Namun, penggunaan yang meluas dan tidak terkontrol telah memicu isu global mengenai resistensi antibiotik pada *C. acnes*. Fenomena ini mendesak pencarian agen antibakteri baru yang lebih efektif, aman, dan memiliki mekanisme kerja yang berbeda.

Cutibacterium acnes merupakan bakteri Gram-positif anaerobik yang umumnya berperan sebagai mikrobioma normal pada kulit manusia. Namun, dalam kondisi tertentu, bakteri ini dapat menjadi patogen oportunistik yang menyebabkan jerawat (*acnes vulgaris*), terutama pada area wajah. Menurut Dréno *et al.* (2018), peningkatan kolonisasi *Cutibacterium acnes* secara signifikan berkontribusi terhadap proses inflamasi dan pembentukan lesi jerawat melalui pembentukan biofilm dan stimulasi respons imun bawaan. Penanganan jerawat umumnya dilakukan menggunakan antibiotik topikal atau oral. Namun, penggunaan antibiotik jangka panjang dapat menyebabkan munculnya resistensi bakteri terhadap terapi yang

diberikan, sehingga efektivitasnya menurun. Oleh karena itu, diperlukan upaya untuk mencari alternatif agen antibakteri yang bersifat alami, aman, dan efektif sebagai pengganti antibiotik konvensional.

Seiring dengan berkembangnya teknologi dibidang bioinformatika dan biokimia komputasi, evaluasi awal terhadap potensi senyawa aktif kini dapat dilakukan melalui pendekatan *in silico*. Salah satu metode yang banyak digunakan adalah *molecular docking*, yaitu simulasi interaksi antara ligan (senyawa aktif) dan reseptor (protein target) dalam ruang tiga dimensi untuk memprediksi kekuatan afinitas dan jenis ikatan pada situs aktif protein target. Pendekatan ini dinilai efisien karena dapat menyaring kandidat senyawa dengan potensi terapeutik sebelum dilakukan pengujian secara *in vitro* dan *in vivo* (Morris & Lim-Wilby, 2008).

Molecular docking merupakan salah satu metode dalam *Computer-Aided Drug Design* (CADD), yang digunakan untuk memodelkan ikatan antara senyawa bioaktif dan target protein secara virtual. Menurut Hasan et al. (2022), teknik ini mampu menggambarkan kemungkinan interaksi serta energi ikat yang timbul dalam sistem kompleks protein-ligan. Pendekatan ini tidak hanya menghemat biaya dan waktu, tetapi juga memungkinkan eksplorasi senyawa alami sebagai kandidat obat secara sistematis dan terarah (Gunawan et al., 2021). Dalam melakukan penambatan molekul dibutuhkan aplikasi penunjang, ligan, dan reseptor (protein target). Ligan sebagai senyawa aktif yang terikat pada asam-asam amino suatu protein, sedangkan reseptor (protein target) merupakan molekul tempat terikatnya ligan dan memiliki ukuran molekul yang besar (Syahputra, 2015).

Dalam penelitian ini, Untuk mengidentifikasi dan memprediksi potensi senyawa tersebut secara efisien, digunakan pendekatan *in silico* (komputasi), khususnya teknik *molecular docking*. Metode ini memungkinkan evaluasi kekuatan ikatan (afinitas) antara molekul metabolit sekunder dari *K. alvarezii* (sebagai ligan) dengan protein spesifik pada *C. acnes* (sebagai reseptor/protein target), seperti enzim Surface Sialidase (PDB: 7LBV), yang diketahui berperan penting dalam virulensi bakteri. Dengan demikian, pendekatan *in silico* berfungsi sebagai skrining awal yang cepat dan terarah, mengurangi biaya, dan mempercepat proses penemuan kandidat antibakteri.

1.2 Tujuan dan Masalah

Tujuan dari penelitian ini yaitu: mengevaluasi potensi senyawa metabolit sekunder dari rumput laut *Kappaphycus alvarezii* sebagai agen antibakteri terhadap *Cutibacterium acnes* melalui metode *in silico* (*molecular docking*)

Manfaat dari penelitian ini yaitu: menambah pengetahuan ilmiah mengenai potensi senyawa bioaktif dari rumput laut *Kappaphycus alvarezii* sebagai agen antibakteri alami, dan memberikan kontribusi dalam pengembangan alternatif terapi jerawat berbasis bahan alam, dan menjadi dasar awal untuk pengembangan riset lanjutan menggunakan pendekatan *in vitro* dan *in vivo*, mendukung pemanfaatan sumber dayati laut Indonesia dalam bidang bioinformatika, farmasi, dan kosmetika.

BAB II METODE PENELITIAN

2.1 Waktu dan Tempat

Penelitian ini dilaksanakan pada bulan Maret hingga Mei tahun 2025. Penelitian dilakukan beberapa lokasi yang mencakup, yaitu: Lokasi pengambilan sampel rumput laut *Kappaphycus alvarezii* dalam kondisi basah dilakukan di Kelurahan Toro, Kecamatan Tanete Riattang Timur, Kabupaten Bone, Provinsi Sulawesi Selatan. Proses ekstraksi (metode maserasi) dilakukan di Laboratorium Teknologi Hasil Perikanan, Fakultas Ilmu Kelautan dan Perikanan, Universitas Hasanuddin, Makassar. Analisis GC-MS (*Gas Chromatography-Mass Spectrometry*) analisis senyawa metabolit sekunder dilakukan di Balai Besar Laboratorium Kesehatan Masyarakat Makassar (BB Labkesmas), Makassar. Uji *in silico* (*molecular docking*) dilakukan menggunakan perangkat lunak Biovia Discovery Studio dan bertempat di Gedung Rektorat Universitas Hasanuddin, tepatnya di Direktorat Inovasi dan Kekayaan Intelektual, Makassar.

2.2 Alat dan Bahan

2.2.1 Alat

Berikut adalah alat-alat yang digunakan dalam penelitian:

Tabel 1 Alat yang digunakan selama penelitian

Nama Alat	Kegunaan
Rotary Vacuum Evaporator	Untuk memisahkan pelarut dalam sampel
GCMS Thermo Scientific™ trace 1310	Untuk menganalisis senyawa aktif dalam sampel
Ultra Komputer	Untuk melakukan simulasi pemodelan <i>in silico</i>
UCSF Chimera 1.16 (3D viewer)	Untuk Preparasi ligan dan reseptor secara visual 3D
Autodocktools -1.5.7	Untuk pemodelan awal <i>molecular docking</i>
Autodock 4.0	Untuk proses perhitungan nilai <i>binding affinity</i>
BIOVIA Discovery Studio Visualizer	Untuk visualisasi hasil <i>molecular docking</i>

2.2.2 Bahan

Berikut adalah bahan – bahan yang digunakan dalam penelitian:

Tabel 2 Bahan yang digunakan selama penelitian

Nama Bahan	Kegunaan
Rumput Laut <i>Kappaphycus alvarezii</i>	Sebagai bahan sampel utama untuk proses ekstraksi
Ekstraksi <i>Kappaphycus alvarezii</i>	Sebagai bahan sampel dalam analisa proses GC-MS
Pelarut Etanol 96%	Sebagai pelarut dalam proses ekstraksi metabolit sekunder
Protein Target /reseptor (bakteri <i>Cutibacterium acnes</i> Kode PDB : 7LVB)	Sebagai reseptor target dalam simulasi <i>molecular docking</i> secara <i>in silico</i>
Ligan (Struktur 3D senyawa aktif rumput laut <i>Kappaphycus alvarezii</i>)	Sebagai ligan dalam simulasi <i>molecular docking</i> secara <i>insilico</i>

2.3 Metode Penelitian

2.3.1 Rancangan Percobaan

Penelitian ini merupakan studi deskriptif prediktif berbasis komputasi untuk mengevaluasi dan memprediksi aktivitas biologis (antibakteri) senyawa metabolit sekunder sebelum diuji secara eksperimental (*in vitro* atau *in vivo*) dan juga menggunakan desain simulasi berbasis komputer (*in silico*) dengan metode *molecular docking*.

2.3.2 Metode Sampling dan preparasi sampel

Pengambilan Sampel rumput laut dengan teknik *purposive sampling*. Sampel yang digunakan dalam penelitian ini adalah rumput laut *Kappaphycus alvarezii* dibeli dari petani yang melakukan panen pada umur 45 hari budidaya laut dan diperoleh dari Kelurahan Toro, Kecamatan Tanete Riattang Timur, Kabupaten Bone, Provinsi Sulawesi Selatan, yang merupakan salah satu wilayah budidaya rumput laut utama dikawasan perairan pesisir laut (Teluk Bone) dan Jenis rumput laut yang digunakan adalah rumput laut merah (*Rhodophyta*). sampel rumput laut segar dikumpulkan sebanyak 30kg dalam kondisi basah, kemudian dimasukkan kedalam wadah plastik bersih dan tertutup guna menjaga kebersihan dan mencegah kontaminasi selama proses transportasi menuju laboratorium. Sebelum dilakukan ekstraksi, sampel basah terlebih dahulu melalui tahap penyiangan (*weed removal*), yaitu proses pembersihan rumput laut dari kotoran, organisme laut kecil, pasir, kerikil, serta sisa-sisa tumbuhan atau biota pengganggu lainnya. Penyiangan dilakukan secara manual melalui sortasi visual dan pencucian dengan air laut bersih. Tujuan dari tahap ini adalah untuk memastikan bahwa bahan yang digunakan dalam proses ekstraksi merupakan rumput laut murni dan bebas dari kontaminan fisik maupun biologis. Setelah proses penyiangan selesai, sampel kemudian siap untuk memasuki tahap

awal yang meliputi pencucian lanjutan dan proses pengeringan atau penyimpanan sementara, dan dilakukan metode ekstraksi.

2.3.3 EKSTRAK RUMPUT LAUT *Kappaphycus alvarezii* DENGAN PELARUT ETANOL 96%

Metode ekstraksi yang digunakan dalam penelitian ini adalah maserasi, yaitu teknik perendaman sampel dalam pelarut organik berdasarkan prinsip perbedaan kelarutan senyawa. Sampel rumput laut *Kappaphycus alvarezii* yang telah dikeringkan menggunakan oven dan dihaluskan dengan chopper, kemudian diekstraksi menggunakan larutan etanol 96% dengan perbandingan 1:4 (b/v). Proses perendaman dilakukan selama 2–3 hari pada suhu ruang dengan pengadukan setiap 1 jam, bertujuan untuk memaksimalkan pelepasan senyawa bioaktif dari jaringan rumput laut ke dalam pelarut. Pemilihan etanol 96% sebagai pelarut didasarkan pada sifat polaritasnya yang tinggi serta kemampuannya mengekstrak berbagai senyawa metabolit sekunder, termasuk flavonoid, saponin, dan tanin. Dalam penelitian ini, digunakan sebanyak 500 g berat sampel dengan 2000 mL pelarut etanol.

Setelah tahap maserasi selesai, campuran disaring menggunakan kertas saring untuk memisahkan residu padatan dan memperoleh filtrat. Filtrat hasil penyaringan selanjutnya diuapkan menggunakan rotary vacuum evaporator pada tekanan 175 mbar dan suhu 45°C selama ± 90 menit. Tahap ini bertujuan untuk menghilangkan pelarut sehingga diperoleh ekstrak pekat yang kaya senyawa bioaktif. Ekstrak pekat inilah yang kemudian digunakan sebagai sampel untuk analisis lanjutan menggunakan *Gas Chromatography–Mass Spectrometry* (GC-MS) dalam identifikasi metabolit sekunder.

Nilai rendemen ekstrak etanol 96% rumput laut *Kappaphycus alvarezii* sebagai berikut:

Keterangan :

$$\text{Rendemen (\%)} : \frac{\text{Berat ekstrak kering}}{\text{Berat sampel awal kering}} \times 100$$

- Rendemen (%) : Persentase (dalam fraksi)
- Berat ekstrak kering : berat ekstrak setelah pelarut dihilangkan (gram)
- Berat sampel awal kering : berat bahan sebelum ekstrak (gram)

2.3.4 Identifikasi senyawa metabolit sekunder rumput laut *Kappaphycus alvarezii* dengan metode *Gas Chromatography-Mass spectrometry* (GC-MS)

Tahap awal dalam analisis GC-MS adalah preparasi sampel yang cermat untuk memastikan kelarutan dan homogenitas senyawa target. Sebanyak 0,1 μL ekstrak dimasukkan ke dalam tabung reaksi steril. Untuk meningkatkan kelarutan senyawa dan mempercepat proses dispersi, ditambahkan sejumlah kecil asam sulfat (H_2SO_4). Asam sulfat bertindak sebagai pelarut tambahan, membantu senyawa aktif agar terdistribusi secara merata dalam larutan. Setelah penambahan H_2SO_4 , larutan dihomogenisasi dan didiamkan selama ± 5 menit untuk mencapai kondisi sistem yang

stabil. Selanjutnya, larutan diproses melalui sentrifugasi untuk memisahkan komponen berdasarkan perbedaan densitas. Proses ini memisahkan sampel menjadi dua fase: fase padatan dan fase cair (supernatan). Hanya fase supernatan, yang mengandung senyawa-senyawa terlarut, yang diambil untuk analisis lebih lanjut. Supernatan ini kemudian dimasukkan ke dalam vial injeksi dan siap untuk dianalisa menggunakan instrumen GC-MS.

Pada instrumen GC-MS, sampel supernatan diinjeksikan dan diuapkan, lalu dibawa oleh gas pembawa (fase gerak) menuju kolom kromatografi. Proses pemisahan senyawa terjadi di dalam kolom kapiler sepanjang 30 meter dengan diameter internal 0,25 mm. Kolom ini dilapisi dengan fase diam non-polar berupa polimer siliko dengan 95% gugus metil + 5% gugus fenil, biasanya digunakan sebagai fase diam dalam kolom GC-MS karena memberikan kestabilan termal, selektivitas dan kemampuan pemisahan yang baik untuk campuran kompleks. Pemisahan senyawa terjadi berdasarkan perbedaan afinitas (interaksi) antara molekul senyawa dengan fase diam. Senyawa yang memiliki afinitas lebih rendah terhadap fase diam akan bergerak lebih cepat dan keluar dari kolom lebih awal, sementara senyawa dengan afinitas lebih tinggi akan tertahan lebih lama.

Kondisi operasi GC-MS Untuk memastikan pemisahan yang optimal, kondisi operasi instrumen diatur secara spesifik: Suhu sumber ion: 200°C dan Suhu interface: 280°C. Selain itu, program suhu kolom juga diatur secara bertahap (gradien suhu untuk memastikan pemisahan senyawa dengan volatilitas yang berbeda. Suhu awal 70°C dipertahankan selama 2 menit. Suhu dinaikkan secara bertahap hingga 280°C dengan laju 4,2°C per menit selama 50 menit. Suhu akhir 280°C dipertahankan selama 8 menit.

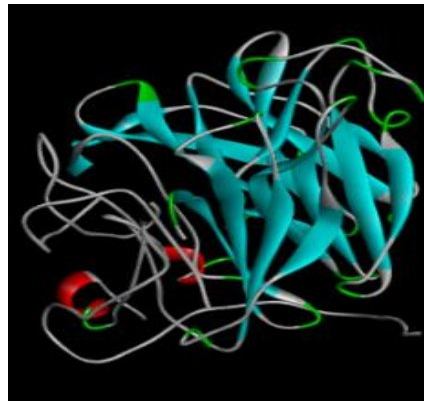
Dengan total waktu analisis 60 menit, program suhu ini memungkinkan senyawa-senyawa dalam ekstrak untuk terpisah berdasarkan volatilitasnya. Senyawa dengan titik didih rendah akan keluar terlebih dahulu, diikuti oleh senyawa dengan titik didih yang lebih tinggi. Setelah senyawa terpisah di kolom GC, masing-masing senyawa memasuki detektor Mass Spectrometry (MS). Di sini, molekul-molekul senyawa diionisasi dan dipecah menjadi fragmen-fragmen ion. Spektrum massa yang dihasilkan pola unik dari fragmen-fragmen ini, kemudian dicocokkan dengan basis data spektrum massa yang ada (seperti NIST Library) untuk mengidentifikasi struktur kimia dari setiap senyawa. Dengan demikian, GC-MS tidak hanya memisahkan senyawa, tetapi juga menyediakan data struktural yang diperlukan untuk identifikasi metabolit sekunder secara akurat.

2.2.5 Proses pelaksanaan Uji *in silico* (molecular docking) dengan interaksi ligan dan reseptor

a. Preparasi reseptor (*Cutibacterium acnes*, kode PDB :7LVB)

Reseptor atau protein target merupakan biomolekul penting yang digunakan untuk mengevaluasi kemampuan ligan dalam berinteraksi dengan situs aktifnya. Dalam penelitian ini, protein target yang digunakan berasal dari bakteri *cutibacterium acnes*, yang dikenal sebagai salah satu penyebab utama gangguan kulit, seperti jerawat. Struktur tiga dimensi (3D) dari protein target

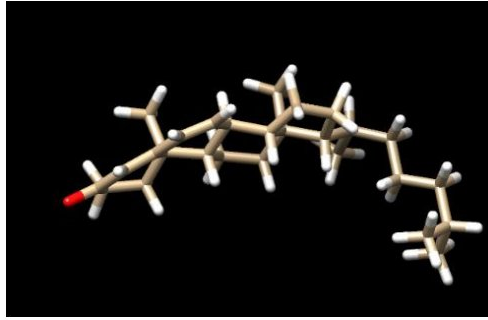
diperoleh melalui basis data Protein Data Bank (PDB) yang dapat diakses melalui situs resmi RCSB PDB (<https://www.rcsb.org>). File protein yang diunduh memiliki ekstensi.pdb yang diperlukan untuk proses *molecular docking*. Setelah file protein berhasil diunduh, tahap selanjutnya Penyimpanan kembali file dalam format.pdb (*Protein Data Bank*). Proses divisualisasikan dan diproses menggunakan perangkat lunak UCSF Chimera versi 1.16. Pada tahap ini dilakukan penambahan atom hidrogen dan menghilangkan molekul air yang tidak perlu. Preparasi ini dilakukan untuk memastikan bahwa struktur protein dalam keadaan optimal dan kompatibel dengan perangkat lunak docking, sehingga dapat digunakan untuk mengevaluasi potensi interaksi dengan senyawa ligan yang ditampilkan pada gambar 2 berikut ini.



Gambar 1 Struktur 3D reseptor/ protein target (*Cutibacterium acnes* kode PDB 7LBV).

b.Preparasi ligan (metabolit sekunder *Kappaphycus alvarezii*)

Ligan merupakan Senyawa (molekul atau ion) yang dapat berikatan secara spesifik dengan molekul target, biasanya protein atau enzim, melalui interaksi kimia tertentu seperti: ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, interaksi elektrostatis. Ligan yang digunakan dalam penelitian ini merupakan metabolit sekunder dari hasil ekstraksi rumput laut *Kappaphycus alvarezii*, yang telah diidentifikasi melalui analisa *Gas Chromatography–Mass Spectrometry (GC-MS)*. Metabolit sekunder yang terdeteksi kemudian ditelusuri struktur kimianya dalam tiga dimensi (3D) melalui situs pubchem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>), dan masing-masing file struktur diunduh dalam format.sdf (*Structure Data File*). Selanjutnya, struktur ligan divisualisasikan dan diproses menggunakan perangkat lunak UCSF Chimera versi 1.16 untuk memastikan bentuk tiga dimensi yang sesuai. Pada tahap ini dilakukan penambahan atom hidrogen polar dan pengecekan struktur molekul, kemudian file disimpan dalam format.pdb (*Protein Data Bank*) sebagai persiapan untuk proses *molecular docking*. Proses ini bertujuan untuk memastikan bahwa ligan siap digunakan dalam uji *molecular docking*, baik sebagai senyawa uji maupun sebagai kontrol positif yang akan dibandingkan terhadap protein target yang ditampilkan pada gambar 3 berikut ini.



Gambar 2. Struktur 3D ligan metabolit sekunder rumput laut *Kappaphycus alvarezii*.

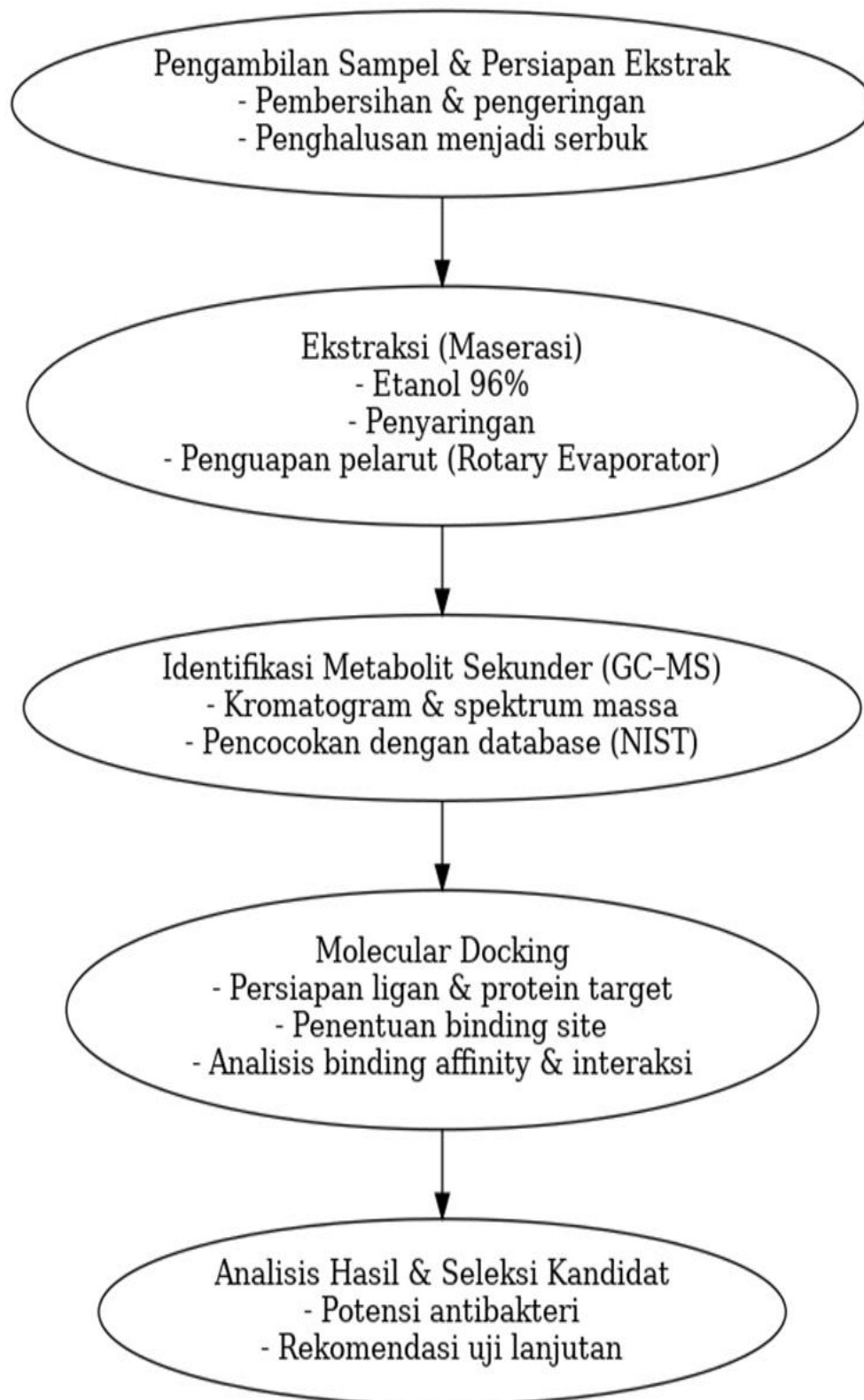
C. Proses Simulasi *Molecular Docking* dengan Ligan-Reseptor

Proses *molecular docking* dalam penelitian ini, dilakukan menggunakan perangkat lunak autodocktools dan autodock 4.0 yang bertujuan untuk memprediksi interaksi antara ligan (metabolit sekunder dari *Kappaphycus alvarezii*) dengan (protein target dari *Cutibacterium acnes*). Langkah pertama dalam proses *molecular docking* adalah preparasi struktur protein target. Struktur protein diunduh dari database protein data bank (PDB) dan dimasukkan kedalam perangkat lunak autodocktools untuk dilakukan pembersihan, yaitu: menghapus molekul air, ion, serta menambahkan atom hidrogen polar dan muatan gasteiger.

Setelah itu, dilakukan penentuan lokasi sisi aktif protein dengan mengatur ukuran *gridbox* yang bervariasi, mulai dari 40cm×40cm×40cmÅ hingga 120cm×120cm×120cmÅ, guna mengidentifikasi area yang paling mungkin menjadi situs interaksi antara protein dan ligan. Setelah situs aktif berhasil ditentukan berdasarkan konformasi terbaik. Proses *molecular docking* dilakukan dengan mengatur *gridbox* menjadi lebih fokus pada area aktif, menggunakan ukuran 40cm×40cm×40cmÅ. Kemudian, proses simulasi *molecular docking* dijalankan menggunakan perangkat lunak autodock 4.0, dengan jumlah *runs* (percobaan) tertentu untuk menghasilkan berbagai kemungkinan konformasi ligan yang menempel pada protein. Hasil *molecular docking* dievaluasi berdasarkan nilai *binding affinity* (dalam satuan kcal/mol) dan jarak ikatan (<2 Å) yang menunjukkan kedekatan interaksi antara ligan dan protein. Hasil interaksi antara ligan dan protein divisualisasikan menggunakan perangkat lunak Biovia Discovery Studio, baik dalam bentuk 2D maupun 3D, untuk memudahkan letak posisi, jenis ikatan, serta residu-residu asam amino yang berperan dalam perlekatan.

d. Visualisasi Hasil *Molecular Docking* dengan interaksi ligan-Reseptor

Visualisasi hasil interaksi antara ligan dan reseptor dilakukan sebagai tahap akhir dari proses *molecular docking*. Tahapan ini bertujuan untuk menginterpretasikan jenis dan lokasi ikatan yang terbentuk antara metabolit sekunder (ligan) dengan situs aktif pada reseptor (protein target). Proses visualisasi dilakukan menggunakan perangkat lunak Biovia Discovery Studio, yang mampu menampilkan hasil *molecular docking* dalam format dua dimensi (2D) dan tiga dimensi (3D). Melalui tampilan visual ini, dapat diidentifikasi yaitu: Jenis ikatan yang terbentuk, seperti ikatan hidrogen, ikatan hidrofobik, interaksi elektrostatik. Residu-residu asam amino pada protein target yang berperan dalam pembentukan interaksi. Konformasi ligan saat berikatan dengan situs aktif protein. Visualisasi ini sangat penting untuk mendukung analisis kualitatif hasil *molecular docking* dan memberikan gambaran mekanisme aksi dari metabolit sekunder diuji terhadap target protein yang relevan dalam konteks antibakteri terhadap *Cutibacterium acnes*.



Gambar 3. Diagram alur pendekatan *Uji in silico* (molecular docking)

2.5 Analisis Data

analisis data pada penelitian ini dilakukan berdasarkan menentukan senyawa metabolit sekunder yang menunjukkan hasil simulasi uji *in silico* (*molecular docking*) menggunakan perangkat lunak Biovia Discovery studio untuk menunjukkan nilai *binding affinity* yang semakin rendah tetapi juga memiliki profil interaksi yang sebanding atau lebih baik dari *clindamycin* menjadikan agen antibakteri *cutibacterium acnes*