

TESIS

**POTENSI MINYAK ATSIRI KULIT BUAH DAN DAUN CITRUS
SEBAGAI ANTIBAKTERI: KAJIAN METABOLOMIK DAN IN SILICO**

OLEH :

FAUZIA HUSNA

2321012013



PEMBIMBING :

- 1. Prof. Dr. apt. ELIDAHANUM HUSNI, M.Si**
- 2. apt. SURYATI, M.Si, Ph.D**

**MAGISTER FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS**

2025

ABSTRAK
POTENSI MINYAK ATSIRI KULIT BUAH DAN DAUN CITRUS
SEBAGAI ANTIBAKTERI: KAJIAN METABOLOMIK DAN IN SILICO

OLEH :
FAUZIA HUSNA
2321012013

Pengobatan infeksi masih didominasi antibiotik yang cenderung memiliki efek samping dan menimbulkan resistensi. Minyak atsiri dari Citrus yang dikenal memiliki aktifitas antibakteri dan dapat dijadikan alternatif untuk pengobatan infeksi yang aman dan efektif. Oleh karena itu penelitian ini bertujuan untuk menentukan profil metabolit, aktifitas antibakteri, senyawa aktif dari minyak atsiri kulit buah dan daun Citrus yang bertanggung jawab untuk menghambat / membunuh bakteri serta mengkonfirmasi senyawa terduga dengan molecular docking. Sebanyak 18 jenis Minyak atsiri dari daun dan Kulit Buah 9 species Jeruk dikoleksi dari daerah Sumatera Barat yaitu Daun Jeruk Lemon (DLm), Kulit Jeruk Lemon (KLm), Daun Jeruk Lunggo (DL), Kulit Jeruk Lunggo (KL), Daun Jeruk Bali (DB), Kulit Jeruk Bali (KB), Daun Jeruk Kasturi (DK), Kulit Jeruk Kasturi (KK), Daun Jeruk Kasiak (DKs), Kulit Jeruk Kasiak (KKs), Daun Jeruk Kasturi Medan (DKm), Kulit Jeruk Kasturi Medan (KKm), Daun Jeruk Nipis (DN), Kulit Jeruk Nipis (KN), Daun Jeruk Purut (DP), Kulit Jeruk Purut (KP), Daun Jeruk Sundai (DS) dan Kulit Jeruk Sundai (KS). Minyak atsiri dianalisis menggunakan Spektroskopi IR dan Kromatografi GC-MS. Aktifitas antibakteri minyak atsiri Citrus diuji terhadap bakteri *Staphylococcus aureus* (ATCC 25423) dengan Metode Broth Microdillution. Studi metabolomik minyak atsiri Citrus ini menggunakan kemometrik dengan model PCA dan HCA untuk pengklasifikasian kemudian dilanjutkan dengan model OPLS-DA. Konfirmasi aktifitas dari senyawa aktif antibakteri dilakukan secara in silico terhadap protein PBP1a dan PBP2a. Analisa senyawa menggunakan Kromatografi GC-MS menunjukkan senyawa dominan pada minyak atsiri jeruk adalah D-Limonene. Pengujian aktifitas antibakteri menunjukkan minyak atsiri dari Daun Jeruk Bali (DB) memiliki aktifitas antibakteri tertinggi dengan nilai MIC dan MBC sebesar 3.125 mg/ml. Berdasarkan studi metabolomik menggunakan data FT IR dengan Model OPLS DA menunjukkan gugus fungsi yang bertanggung jawab terhadap aktifitas antibakteri adalah C-H, C=C, C=O, CH₂, CH₃. Analisa model OPLS DA menggunakan data GC MS diperoleh senyawa yang diduga aktif menghambat terhadap bakteri *S. aureus* adalah D-Limonene, L-B Pinene, γ Terpinene, β Citral dan Citral sedangkan senyawa yang aktif membunuh bakteri *S. aureus* adalah L- β -Pinene, β Citral dan Citral. Senyawa D-Limonene menunjukkan skor docking tertinggi terhadap protein PBP 1a 3UDI (-6.212 kcal/mol) dan protein PBP 2a 1MWT (-5.231 kcal/mol). Dengan demikian dapat disimpulkan bahwa minyak atsiri dari Daun Jeruk Bali dapat dikembangkan sebagai agen antibakteri.

Kata kunci: Citrus, Metabolomik, Kemometrik, Antibakteri, In Silico

ABSTRACT

THE POTENTIAL OF CITRUS PEELS AND LEAVES OIL AS ANTI-BACTERIAL AGENTS: A METABOLOMIC AND IN SILICO STUDY

By: FAUZIA HUSNA
Student ID Number : 2321012013

The treatment of infections is still dominated by antibiotics, which tend to have side effects and cause resistance. Essential oils from Citrus, known for their antibacterial activity, can serve as a safe and effective alternative for treating infections. Therefore, this study aims to determine the metabolite profile, antibacterial activity, and active compounds in essential oils from Citrus peels and leaves that are responsible for inhibiting/killing bacteria, as well as to confirm the putative compounds through molecular docking. A total of 18 types of essential oils from the leaves and peels of 9 species of citrus were collected from the West Sumatra region, namely lemon leaves (DLm), lemon peels (KLm), Citron leaves (DL), Citron peels (KL), Pomelo Leaves (DB), Pomelo Peels (KB), Calamansi Leaves (DK), Calamansi Peels (KK), Amblycarpa Lime Leaves (DKs), Amblycarpa Lime Peels (KKs), Calamondin Leaves (DKm), Calamondin Peels (KKm), Key Lime Leaves (DN), Key Lime Peels (KN), Kaffir Lime Leaves (DP), Kaffir Lime Peels (KP), Sundai Leaves (DS) and Sundai Peels (KS). The essential oils were analysed using IR spectroscopy and GC-MS chromatography. The antibacterial activity of Citrus essential oils was tested against *Staphylococcus aureus* (ATCC 25423) bacteria using the broth microdilution method. The metabolomic study of Citrus essential oils used chemometrics with PCA and HCA models for classification, followed by the OPLS-DA model. Confirmation of the activity of antibacterial active compounds was performed in silico against PBP1a and PBP2a proteins. Analysis of compounds using GC-MS chromatography showed that the dominant compound in citrus essential oil was D-Limonene. Antibacterial activity testing showed that essential oil from Pomelo Leaves (DB) had the highest antibacterial activity with MIC and MBC values of 3.125 mg/ml. Based on metabolomic studies using FT IR data with the OPLS DA model, the functional groups responsible for antibacterial activity were C-H, C=C, C=O, CH₂, and CH₃. OPLS DA model analysis using GC MS data obtained compounds that are suspected to be active in inhibiting *S. aureus* bacteria, namely D-Limonene, L-B Pinene, γ Terpinene, β Citral and Citral, while the compounds that are active in killing *S. aureus* bacteria are L- β -Pinene, β Citral and Citral. The compound D-Limonene showed the highest docking score against the PBP 1a 3UDI protein (-6.212 kcal/mol) and the PBP 2a 1MWT protein (-5.231 kcal/mol). Thus, it can be concluded that essential oil from Pomelo leaves can be developed as an antibacterial agent.

Keywords: Citrus, Metabolomics, Chemometrics, Antibacterial, In Silico