JURNAL BIOSENSE
Jurnal Penelitian Biologi dan Terapannya
Volume 9 No. 4, Oktober 2026, Hal 1016 - 1027 E-ISSN: 2622 - 6286

ANALISIS DOCKING MOLEKULER 4H-PHYRAN-ONE DARI BUNGA *CLITORIA TERNATEA* L. TERHADAP TRANS-2-ENOYL-ACYL CARRIER PROTEIN REDUCTASE (FABI) SEBAGAI AGEN ANTIBAKTERI POTENSIAL

Tamalia[1)*], Yusri Juma[1)], Rasmy Hi Panu[1)], Zulkifli I. Tuara[2)]
[1]Departemen Biologi, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Nahdlatul Ulama Maluku Utara
Jl. Cempaka, Tanah Tinggi, Kota Ternate, Maluku Utara Indonesia
[2]Departemen Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Nahdlatul Ulama Maluku Utara
Jl. Cempaka, Tanah Tinggi, Kota Ternate, Maluku Utara Indonesia
e-mail: tamaliacici99@gmail.com

Abstrak

Meningkatnya prevalensi resistensi antimikroba telah mendorong eksplorasi senyawa bioaktif yang berasal dari tumbuhan sebagai agen antibakteri alternatif. *Clitoria ternatea* L. (bunga telang) mengandung berbagai senyawa bioaktif, termasuk 4H-Pyran-4-one, yang dilaporkan memiliki sifat antimikroba. Studi ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi antibakteri 4H-Pyran-4-one terhadap trans-2-enoyl-acyl carrier protein reductase (FabI), enzim penting yang terlibat dalam biosintesis asam lemak bakteri, menggunakan penambatan molekuler dan prediksi ADMET. Struktur kristal FabI (PDB ID: 5CG1) diperoleh dari Protein Data Bank, sedangkan penambatan molekuler dilakukan menggunakan CB-Dock2 yang terintegrasi dengan AutoDock Vina. Tetrasiklin digunakan sebagai senyawa antibakteri referensi. Hasil penambatan menunjukkan bahwa 4H-Pyran-4-one menunjukkan afinitas pengikatan sebesar −5,5 kkal/mol, sedangkan tetrasiklin menunjukkan afinitas yang lebih kuat sebesar −9,0 kkal/mol. Analisis interaksi mengungkapkan bahwa 4H-Pyran-4-one membentuk dua ikatan hidrogen dengan THR38 dan interaksi hidrofobik dengan ILE92 dan VAL65. Analisis SwissADME menunjukkan sifat farmakokinetik yang menguntungkan, termasuk penyerapan gastrointestinal yang tinggi, kelarutan dalam air yang sangat baik, dan kepatuhan terhadap Aturan Lima Lipinski tanpa pelanggaran. Temuan ini menunjukkan bahwa 4H-Pyran-4-one memiliki karakteristik yang menjanjikan sebagai senyawa utama untuk pengembangan agen antibakteri yang ditargetkan pada FabI dengan afinitas pengikatan sebesar −5,5 kkal/mol.

Kata kunci: *Clitoria ternatea, 4H-Pyran-4-one, FabI, molecular docking, antibacterial.*

Abstract

The rising prevalence of antimicrobial resistance has driven the exploration of plant-derived bioactive compounds as alternative antibacterial agents. *Clitoria ternatea* L. (butterfly pea) contains various bioactive compounds, including 4H-Pyran-4-one, which is reported to possess antimicrobial properties. This study aimed to evaluate the antibacterial potential of 4H-Pyran-4-one against *trans*-2-enoyl-acyl carrier protein reductase (FabI)—a crucial enzyme in bacterial fatty acid biosynthesis—using molecular docking and ADMET prediction methods.

JURNAL BIOSENSE
Jurnal Penelitian Biologi dan Terapannya
Volume 9 No. 4, Oktober 2026, Hal 1016 - 1027 E-ISSN: 2622 - 6286

The crystal structure of FabI (PDB ID: 5CG1) was obtained from the Protein Data Bank, while molecular docking was performed using CB-Dock2, integrated with AutoDock Vina. Tetracycline was used as a reference antibacterial compound. Docking results showed that 4H-Pyran-4-one had a binding affinity of −5.5 kcal/mol, whereas tetracycline exhibited a stronger affinity of −9.0 kcal/mol. Interaction analysis revealed that 4H-Pyran-4-one formed two hydrogen bonds with THR38 and hydrophobic interactions with ILE92 and VAL65. SwissADME analysis indicated favorable pharmacokinetic properties, including high gastrointestinal absorption, excellent water solubility, and compliance with Lipinski's Rule of Five with no violations. These findings indicate that 4H-Pyran-4-one possesses promising characteristics as a lead compound for the development of FabI-targeting antibacterial agents, with a binding affinity of −5.5 kcal/mol.

Keywords: *Clitoria ternatea, 4H-Pyran-4-one, FabI, molecular docking, antibacterial.*

1. PENDAHULUAN

Resistensi antimikroba (AMR) telah muncul sejak beberapa tahun terakhir hingga saat ini sebagai salah satu ancaman paling signifikan bagi kesehatan masyarakat global maupun masyarakat Indonesia. Penggunaan dan penyalahgunaan antibiotik yang meluas telah mempercepat berkembangnya strain bakteri resisten. Menghentikan konsumsi antibiotik sebelum antibiotik yang disarankan habis telah menjadi salah satu penyebab berkurangnya efektivitas terapi antimikroba yang tersedia saat ini. Akibatnya, studi eksplorasi hingga penemuan agen antibakteri baru dari sumber daya alam menjadi semakin penting (Nayyiroh Hilya A. dan Dwyana Zaraswati, 2026)

Clitoria ternatea L., yang umumnya dikenal sebagai bunga telang atau bunga kacang kupu-kupu, adalah tanaman obat yang tumbuh liar dan tersebar luas di daerah tropis. Tanaman ini secara tradisional telah banyak digunakan untuk berbagai tujuan terapeutik dan dilaporkan memiliki aktivitas antioksidan dengan menangkal radikal bebas, antiinflamasi, antimikroba, antidiabetes dan neuroprotektif. Studi fitokimia telah mengungkapkan adanya flavonoid, antosianin, alkaloid, dan turunan piranon di dalam tanaman ini (Denta Kusuma, 2019; Magharaniq Safira Purwanto & Aprilia, 2022).

Agen antimikroba telah banyak ditemukan pada produk berbahan dasar alam. Namun, ada beberapa agen antimikroba yang sudah tidak efektif lagi digunakan karena banyaknya mikroba yang menjadi resisten dan efek samping yang merugikan penderita.

Sehingga banyak penelitian yang mengeksplor lebih dalam lagi terkait tanaman herbal yang berpotensi sebagai antibakteri (Akram et al., 2016; Rais Khasanah et al., 2021)

Salah satu senyawa yang teridentifikasi dalam ekstrak bunga telang adalah 4H-Pyran-4-one, senyawa heterosiklik yang mengandung gugus fungsional oksigen yang mampu berinteraksi dengan makromolekul biologis. Diketahui bahwa senyawa golongan phyran menunjukkan aktivitas biologis yang tinggi, salah satunya adalah aktivitas antimikroba. Namun, informasi mengenai mekanisme molekuler senyawa ini terhadap target bakteri masih terbatas (Fedin et al., 2023)

Trans-2-enoyl-acyl carrier protein reductase (FabI) adalah enzim kunci yang terlibat dalam jalur sintesis asam lemak tipe II (FAS-II) bakteri. Enzim ini mengkatalisis reaksi yang bergantung pada NADH. Pengurangan intermediat trans-2-enoyl-ACP selama pemanjangan asam lemak. Penghambatan FabI mengganggu biosintesis lipid membran dan akibatnya menekan pertumbuhan bakteri. Oleh karena itu, FabI merupakan target yang menarik untuk penemuan obat antibakteri.

Studi *docking* molekuler menyediakan pendekatan komputasional untuk memprediksi interaksi ligan-protein dan mengevaluasi potensi aktivitas penghambatan senyawa bioaktif. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk menyelidiki interaksi 4H-Pyran-4-one dari *Clitoria ternatea* dengan FabI (PDB ID: 5CG1) dan membandingkan profil interaksinya dengan tetrasiklin sebagai senyawa antibakteri referensi.

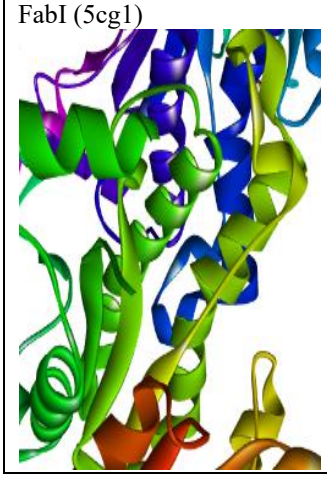
2. METODE PENELITIAN

2.1 Persiapan Protein

Struktur kristal tiga dimensi trans-2-enoyl-acyl carrier protein reductase (FabI) diperoleh dari Protein Data Bank (PDB ID: 5CG1). Molekul air dan heteroatom yang tidak perlu dihilangkan sebelum analisis docking dengan menggunakan aplikasi *Discovery Studio*.

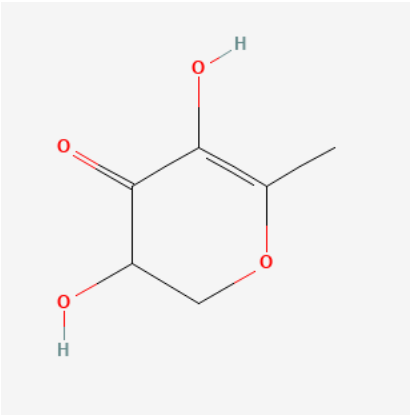
JURNAL BIOSENSE
Jurnal Penelitian Biologi dan Terapannya
Volume 9 No. 4, Oktober 2026, Hal 1016 - 1027 E-ISSN: 2622 - 6286

Tabel 1. Residu dari Protein FabI (5CG1)

Protein	Residu
FabI (5cg1) 	B_100 B_13 B_144 B_145 B_146 B_154 B_155 B_156 B_159 B_163 B_189 B_19 B_190 B_191 B_192 B_194 B_20 B_203 B_206 B_91 B_92 B_93 B_94 B_95

2.2 Persiapan Ligan

Struktur molekuler 4H-Pyran-4-one diperoleh dari basis data PubChem dan dikonversi ke format Structure Data File (SDF). Sedangkan senyawa pembanding tetrasiklin digunakan sebagai ligan antibakteri referensi yang sudah umum digunakan dalam kehidupan sehari-hari.



Gambar 1. Struktur 2D Senyawa 4H-Pyran-4-one,2,3-dihydro-3,5-dihydro-3,5-dihydroxy-6-metyl (Pubchem)

2.3 Docking Molekuler

Simulasi docking molekuler dilakukan menggunakan CB-Dock2, yang mengintegrasikan deteksi rongga dengan penilaian AutoDock Vina. Prosedur

penambatan secara otomatis mengidentifikasi kantong pengikatan potensial dan menghasilkan nilai afinitas pengikatan yang dinyatakan sebagai skor Vina (kkal/ mol). Posisi penambatan terbaik dipilih berdasarkan energi pengikatan terendah.

2.4 Analisis interaksi

Interaksi protein-ligan dianalisis menggunakan *Discovery Studio Visualizer*. Ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, dan interaksi van der Waals antara ligan dan residu asam amino diidentifikasi dan diinterpretasikan.

2.5 Prediksi ADMET 2.5

Sifat farmakokinetik dan kemiripan obat dari 4H-Pyran-4-one diprediksi menggunakan SwissADME. Parameter yang dievaluasi meliputi berat molekul, donor dan akseptor ikatan hidrogen, luas permukaan polar topologi (TPSA), lipofilisitas, kelarutan, penyerapan gastrointestinal, permeabilitas sawar darah-otak, penghambatan sitokrom P450, dan Aturan Lima Lipinski.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1 Hasil Penelitian

Docking molekuler yang dilakukan akan menampilkan nilai *binding affinity* yang merupakan validator dari hasil *docking* untuk menunjukkan nilai interaksi antara ligan dan protein selaku reseptor yang diuji. Hasil docking molekuler tersebut menunjukkan bahwa kedua ligan mampu berikatan di dalam rongga protein FabI. Namun, tetrasiklin sebagai senyawa referensi menunjukkan afinitas pengikatan yang lebih kuat dibandingkan dengan 4H-Pyran-4-one.

Tabel 2. Skor docking molekuler enzim FabI (5CG!) dengan ligan 4H-Phyran-4-One dan tetrasiklin

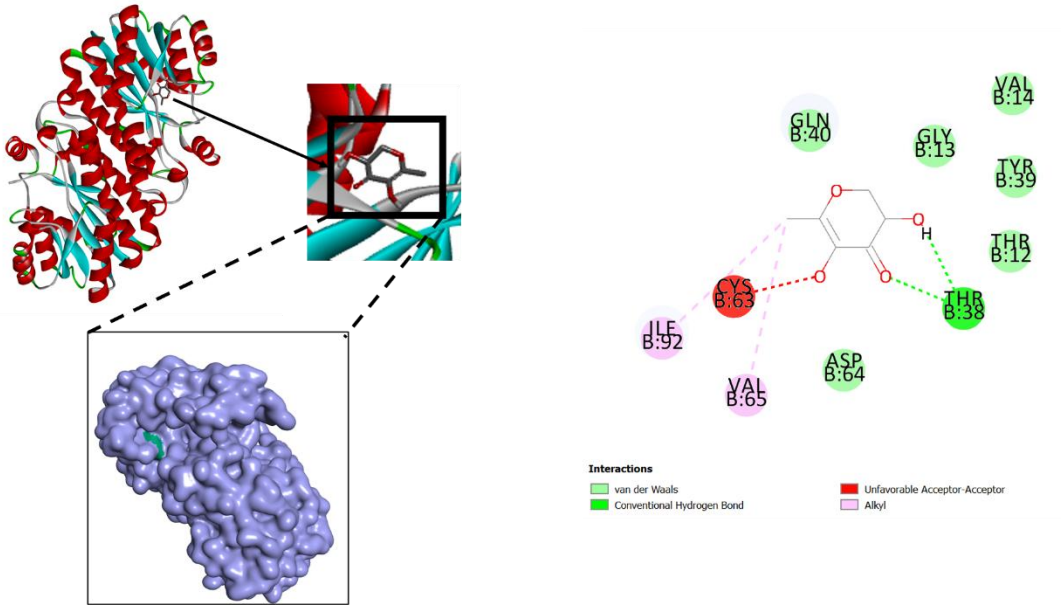
Ligan	Skor Docking Vina Terbaik (kkal/mol)
4H-phyran-4-one	-5,5
Tetrasiklin	-9,0

JURNAL BIOSENSE
Jurnal Penelitian Biologi dan Terapannya
Volume 9 No. 4, Oktober 2026, Hal 1016 - 1027 E-ISSN: 2622 - 6286

Skor pengikatan yang lebih rendah yang diamati untuk tetrasiklin menunjukkan interaksi yang lebih kuat dengan FabI. Meskipun demikian, energi pengikatan negatif yang diperoleh untuk 4H-Pyran-4-one menunjukkan pengikatan spontan dan menguntungkan di dalam rongga enzim.

Analisis interaksi 4H-Pyran-4-one

Analisis interaksi hasil docking molekuler mengungkapkan bahwa senyawa 4H-Pyran-4-one membentuk dua ikatan hidrogen konvensional dengan THR38. Interaksi hidrofobik tambahan diamati dengan ILE92 dan VAL65. Lebih lanjut, beberapa residu, termasuk GLN40, GLY13, VAL14, TYR39, THR12, dan ASP64, berkontribusi melalui interaksi van der Waals. Hal ini sebagaimana tersaji pada gambar di bawah ini;



Gambar 2. Visualisasi Docking Molekuler 4H-Phyran-4-One dan Enzim FabI (5CG1)

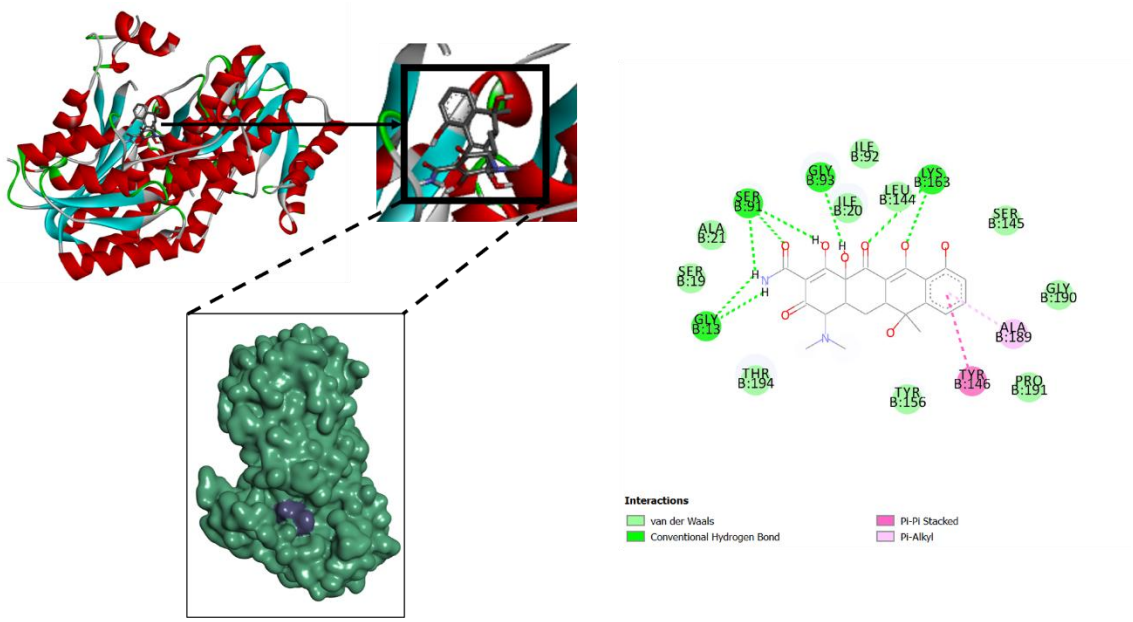
Interaksi akseptor-akseptor yang tidak menguntungkan diamati dengan CYS63, yang menunjukkan kemungkinan tolakan elektrostatik yang dapat mengurangi stabilitas pengikatan secara keseluruhan.

Analisis interaksi tetrasiklin

Tetrasiklin membentuk tiga ikatan hidrogen konvensional dengan GLY13, GLY93, dan LYS163. Interaksi hidrofobik diamati dengan TYR146 dan ALA189.

JURNAL BIOSENSE
Jurnal Penelitian Biologi dan Terapannya
Volume 9 No. 4, Oktober 2026, Hal 1016 - 1027 E-ISSN: 2622 - 6286

Kontak van der Waals tambahan melibatkan SER19, ALA21, ILE20, ILE92, LEU144, SER145, TYR156, THR194, GLY190, dan PRO191. Hal ini sebagaimana tersaji pada gambar di bawah ini;



Gambar 3. Visualisasi Docking Molekuler Senyawa Tetrasiklin dan Enzim FabI (5CG1)

Jumlah interaksi yang lebih banyak menjelaskan afinitas pengikatan yang lebih kuat yang ditunjukkan oleh tetrasiklin dibandingkan dengan 4H-Pyran-4-one.

Analisis ADMET dan Kemiripan Obat

Senyawa 4H-Phyran-4-one menunjukkan karakteristik kemiripan obat yang menguntungkan, termasuk berat molekul rendah, kelarutan tinggi, penyerapan gastrointestinal tinggi, dan kepatuhan penuh terhadap Aturan Lima Lipinski. Karakteristik atau aspek yang dilihat dari analisis ADMET memiliki fungsinya masing-masing

Tabel 3. Sifat fisikokimia dan farmakokinetik 4H-Phyran-4-One

Aspek	Hasil
Kelarutan	Sangat baik (Very Soluble)
Absorpsi oral	Tinggi (High GI Absorption)
Penetrasi BBB	Tidak menembus BBB

Aspek	Hasil
Interaksi CYP450	Tidak menghambat seluruh isoenzim utama
Drug-likeness	Memenuhi Lipinski, Veber, dan Egan
Potensi sebagai Antibakteri	Baik berdasarkan profil ADME dan farmakokinetik

3.2. Pembahasan Penelitian

FabI merupakan target antibakteri yang telah teruji karena perannya yang krusial dalam biosintesis asam lemak bakteri. Inhibisi FabI mengganggu pembentukan membran dan pertumbuhan bakteri. Interaksi hidrogen dan hidrofobik berkontribusi besar terhadap stabilitas kompleks FabI-ligan. FabI memiliki rongga pengikatan substrat yang fleksibel yang mampu mengakomodasi ligan yang beragam secara struktural. Oleh karena itu, senyawa yang mampu berinteraksi dengan FabI berpotensi memiliki sifat antibakteri (Hasan et al., 2023)

Senyawa aktiv 4H-Phyran-4-one,2,3-dihydro-3,5-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl merupakan senyawa yang teridentifikasi pada ekstrak daun dan bunga Clitoria ternatea yang termasuk ke dalam golongan flavonoid dengan kemampuan antioksidan yang tinggi dengan peranan untuk meningkatkan kesehatan tubuh yang telah diketahui dari beberapa penelitian bahwa senyawa ini memiliki sifat antimikroba dan anti-inflamasi (Ragupathi Raja Kannan et al., 2012; Kumar et al., 2023)

Penelitian docking molekuler ini menunjukkan bahwa 4H-Pyran-4-one dapat berikatan dengan FabI dengan skor pengikatan sebesar −5,5 kcal/mol. Meskipun nilai ini lebih rendah daripada tetrasiklin (−9,0 kkal/mol), ligan tersebut membentuk interaksi penstabilan melalui ikatan hidrogen dan kontak hidrofobik. Ikatan hidrogen dengan THR38 dapat berkontribusi secara signifikan terhadap stabilisasi ligan di situs aktif.

Tetrasiklin menunjukkan interaksi jaringan yang lebih kuat, melibatkan tiga ikatan hidrogen dan beberapa kontak hidrofobik. Afinitas pengikatan tetrasiklin yang lebih unggul kemungkinan terkait dengan kerangka molekulnya yang lebih besar dan jumlah gugus fungsional yang lebih banyak yang mampu membentuk interaksi antarmolekul.

Afinitas yang lebih kuat yang diamati untuk tetrasiklin kemungkinan disebabkan oleh kerangka molekulnya yang lebih besar dan banyaknya gugus fungsional yang mengandung oksigen yang mampu membentuk jaringan ikatan hidrogen yang luas. Pengamatan serupa telah dilaporkan untuk inhibitor FabI yang dikenal, di mana ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik memainkan peran penting dalam penghambatan enzim. Meskipun menunjukkan afinitas yang lebih rendah, 4H-Pyran-4-one tetap merupakan senyawa utama yang menarik karena strukturnya yang relatif sederhana. Modifikasi struktural melalui pendekatan kimia medisinal dapat meningkatkan afinitas pengikatan dan meningkatkan potensi antibakterinya.

4H-Pyran-4-one menunjukkan sifat farmakokinetik yang menguntungkan. Senyawa ini menunjukkan kelarutan dalam air yang sangat baik dan penyerapan gastrointestinal yang tinggi yang bermanfaat untuk meningkatkan bioavailabilitas. Hal ini dikarenakan senyawa 4H-Pyran-4-one memenuhi aturan Veber dan Egan yang berkaitan dengan permeabilitas dan bioavailabilitas oral yang baik, sehingga menguntungkan sebagai kandidat obat yang diberikan secara oral. Untuk pengembangan antibakteri sistemik, karakteristik senyawa ini diprediksi tidak mampu menembus Blood-Brain Barrier (BBB permeant = No), sehingga dapat dikatakan cukup menguntungkan karena dapat mengurangi potensi efek samping pada sistem saraf pusat. Lebih lanjutnya, tidak adanya prediksi penghambatan terhadap enzim CYP450 utama menunjukkan risiko interaksi obat-obat metabolik yang lebih rendah (Wang et al., 2007).

Kombinasi skor docking dan profil ADMET yang diprediksi menunjukkan bahwa 4H-Pyran-4-one berpotensi menjadi kandidat awal untuk penelitian lebih lanjut. Namun, hasil prediksi komputasi tersebut belum cukup untuk memastikan aktivitas inhibisi FabI maupun kelayakannya sebagai kandidat antibakteri. Optimasi struktur berbasis farmakofor dan analisis hubungan kuantitatif struktur–aktivitas dapat digunakan untuk mengidentifikasi modifikasi kimia yang berpotensi meningkatkan interaksi ligan dengan sisi aktif FabI (Lu et al., 2012).

Keberadaan interaksi dengan residu-residu pada rongga pengikatan FabI juga dapat menjadi dasar untuk mengevaluasi kestabilan kompleks dan merancang modifikasi struktur

lebih lanjut. Meskipun demikian, prediksi afinitas melalui molecular docking perlu dikonfirmasi melalui pengujian eksperimental karena skor docking tidak selalu berkorelasi langsung dengan afinitas pengikatan maupun aktivitas biologis aktual (Pantsar & Poso, 2018). Oleh karena itu, penelitian lanjutan perlu mencakup optimasi struktur, pengujian inhibisi enzim FabI, serta evaluasi aktivitas antibakteri secara *in vitro*.

4. KESIMPULAN DAN SARAN

4.1 Kesimpulan

Studi ini menunjukkan bahwa 4H-Pyran-4-one dari *Clitoria ternatea* dapat berinteraksi dengan FabI (PDB ID: 5CG1) dengan afinitas pengikatan sebesar −5,5 kkal/mol. Senyawa ini membentuk dua ikatan hidrogen dengan THR38 dan beberapa interaksi hidrofobik di dalam kantung pengikatan enzim. Meskipun tetrasiklin menunjukkan afinitas yang lebih kuat (−9,0 kkal/mol), 4H-Pyran-4-one menunjukkan kemiripan obat dan sifat farmakokinetik yang menguntungkan, termasuk penyerapan gastrointestinal yang tinggi, kelarutan yang sangat baik, dan kepatuhan terhadap Aturan Lima Lipinski. Temuan ini menunjukkan bahwa 4H-Pyran-4-one berpotensi sebagai senyawa utama untuk pengembangan agen antibakteri baru yang menargetkan FabI. Studi lebih lanjut yang melibatkan simulasi dinamika molekuler dan uji antibakteri in vitro diperlukan untuk memvalidasi aktivitas biologisnya.

4.2 Saran

Penelitian selanjutnya disarankan untuk melanjutkan pengujian secara in vitro dan in vivo guna memvalidasi hasil studi in silico secara eksperimental.

5. REFERENSI

Angriani, L. (2019). *Potensi Ekstrak Bunga Telang (Clitoria Ternatea) Sebagai Pewarna Alami Lokal Pada Berbagai Industri Pangan (The Potential of Extract Butterfly Pea Flower (Clitoria ternatea L.) as a Local Natural Dye for Various Food Industry)*. *2*(1) 32-37. https://doi.org/10.20956/canrea.v2i1.120

Daina A, Michielin O, Zoete V. SwissADME: Alat web gratis untuk mengevaluasi farmakokinetika, kemiripan obat, dan keramahan kimia medisinal dari molekul kecil.Laporan Ilmiah 2017;7:42717. https://doi.org/10.1038/srep42717

Fedin VV, Obydennov DL, Usachev SA, Sosnovskikh VY. 2023. *4-Hydroxy-2-pyrones: Synthesis, Natural Products, and Application*. Organics, 4(4):539–561. https://doi.org/10.3390/org4040037

Hasan S, Kayed K, Ghemrawi R, et al. 2023. *Molecular Modelling Study and Antibacterial Evaluation of Diphenylmethane Derivatives as Potential FabI Inhibitors*. Molecules, 28(7):3000. https://doi.org/10.3390/molecules28073000

Heath RJ, White SW, Rock CO. Biosintesis asam lemak sebagai target untuk antibakteri baru. Kemajuan dalam Penelitian Lipid. 2001;40(6):467–497.

Khasanah H. R., dan Nugraheni D. E. 2021. Uji Aktivitas Antimikroba Ekstrak Etanol Biji Kebiul (Caesalpinia Bondus (L.) Roxb) Terhadap Pertumbuhan Bakteri Staphylococcus Aureus. Jurnal ilmiah. Vol. 16. No. 1. ISSN: 1978 – 0664

Kumar et al. 2023. *Synthesis and antibacterial activity of pyrano[3,2-g]chromene-4,6-dione derivatives and their molecular docking and DFT calculation studies*. Results in Chemistry, 101175. https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.101175

Liu Y, Grimm M, Dai WT, Hou MC, Xiao ZX, Cao Y. CB-Dock2: peningkatan penambatan protein-ligan buta dengan mengintegrasikan deteksi rongga, penambatan, dan pencocokan templat homolog. Nucleic Acids Research. 2022;50(W1):W159–W164. https://doi.org/10.1093/nar/gkac394

Lu, P., et al. (2012). Pharmacophore and molecular docking guided 3D-QSAR study of bacterial enoyl-ACP reductase FabI inhibitors. https://doi.org/10.3390/ijms13066620

Massengo-Tiassé RP, Cronan JE. Keragaman dalam reduktase protein pembawa enoil-asil. Ilmu Kehidupan Seluler dan Molekuler. 2009;66:1507–1517. https://doi.org/10.1007/s00018-009-8704-7

Mukherjee PK, Kumar V, Kumar NS, Heinrich M. Obat Ayurveda Clitoria ternatea— Dari penggunaan tradisional hingga penilaian ilmiah. Jurnal Etnofarmakologi. 2008;120(3):291–301. https://doi.org/10.1016/j.jep.2008.09.009

Nayyiroh Hilya A. dan Dwyana zaraswati, 2026. Uji Aktivitas Antibakteri Ekstrak Daun Turi Sesbania Grandiflora L. Terhadap Staphylococcus Aureus. Bioma: Jurnal Biologi Makassar. Volume 11 No 2. https://doi.org/10.20956/bioma.v11i2.49992

Pantsar, T., & Poso, A. (2018). Binding affinity via docking: Fact and fiction. Molecules, 23(8), Article 1899. https://doi.org/10.3390/molecules23081899

Trott O, Olson AJ. AutoDock Vina: Meningkatkan kecepatan dan akurasi docking dengan fungsi scoring baru, optimasi efisien, dan multithreading. Jurnal Kimia Komputasi. 2010;31(2):455–461. https://doi.org/10.1002/jcc.21334

Wright, G. D. (2017). Opportunities for natural products in 21st century antibiotic discovery. Natural Product Reports, 34(7), 694–701. https://doi.org/10.1039/C7NP00019G.

Yao J, Rock CO. (2017). Bacterial fatty acid metabolism in modern antibiotic discovery. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Molecular and Cell Biology of Lipids, 1862(11), 1300–1309. https://doi.org/10.1016/j.bbalip.2016.09.014