

Potensi Senyawa Timokuinon

by Nadiyah Zuhroh

Submission date: 10-Jul-2025 10:16AM (UTC+0700)

Submission ID: 2712700687

File name: 1775-File_Utama_Naskah-9870-2-10-20250421_1.pdf (616.82K)

Word count: 3388

Character count: 21404

LIPIDA

JURNAL TEKNOLOGI PANGAN DAN AGROINDUSTRI PERKEBUNAN

<https://jurnal.politap.ac.id/index.php/lipida>

Potensi Senyawa Timokuinon, Timol, dan Karvakrol dari Jintan Hitam (*Nigella sativa*) sebagai Agen Antibakteri Alami dalam Keamanan Pangan: Analisis *In Silico* terhadap *Escherichia coli* dan *Salmonella*

Naadyah Zuhroh¹, Rasmiyana Rasmiyana¹, Yulia Rachmawati³

¹Teknologi Rekayasa Pangan, Teknologi Pertanian, Politeknik Negeri Jember, Jl. Mastrip PO BOX

164, Jawa Timur, Indonesia

email : nadiyah_zuhroh@polije.ac.id

Info Artikel	Abstrak
Sejarah Artikel: Diterima 15 Maret 2025 Disetujui 21 April 2025 Di Publikasi April 2025	Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa aktif jintan hitam (<i>Nigella sativa</i>), yaitu timokuinon, timol, dan karvakrol, sebagai agen antibakteri alami dalam keamanan pangan terhadap bakteri patogen <i>Escherichia coli</i> dan <i>Salmonella</i> . Metode <i>molecular docking</i> digunakan untuk menganalisis interaksi senyawa-senyawa tersebut dengan protein target bakteri, yaitu GyraseB pada <i>E. coli</i> dan LsrB pada <i>S. typhi</i> . Hasil penelitian menunjukkan bahwa ketiga senyawa mampu berikatan dengan protein target melalui interaksi hidrogen, hidrofobik, dan elektrostatis. Karvakrol menunjukkan energi ikat terkuat (-177,5 Kkal/mol) terhadap <i>E. coli</i> , sedangkan timokuinon memiliki energi ikat terkuat (-186,0 Kkal/mol) terhadap <i>S. typhi</i> . Selain itu, penelitian ini mengungkap potensi penghambatan senyawa ligan terhadap <i>Salmonella typhi</i> resisten, yang mengindikasikan kemungkinan penggunaan senyawa-senyawa tersebut untuk mengatasi masalah resistensi bakteri dalam kontaminasi pangan. Temuan ini masih memerlukan pengkajian lebih lanjut secara <i>in vitro</i> dan <i>in vivo</i> . Penelitian ini memberikan wawasan penting untuk pengembangan bahan antibakteri alami dalam industri pangan, khususnya dalam mencegah kontaminasi bakteri patogen dan meningkatkan keamanan pangan.
Kata kunci: Antibakteri alami, <i>In silico</i> , Keamanan Pangan, <i>Nigella sativa</i> , <i>Salmonella</i>	

Potential of Thymoquinone, Thymol, and Carvacrol from Black Seed (*Nigella sativa*) as Natural Antibacterial Agents in Food Safety: In Silico Analysis against *Escherichia coli* and *Salmonella*

Keywords:

In silico, Food safety, Natural antibacteria, *Nigella sativa*, *Salmonella*

Abstract

This study aims to evaluate the potential of active compounds from black seed (*Nigella sativa*), namely thymoquinone, thymol, and carvacrol, as natural antibacterial agents in food safety against pathogenic bacteria *Escherichia coli* and *Salmonella typhi*. The molecular docking method was used to analyze the interactions between these compounds and bacterial target proteins, namely GyraseB in *E. coli* and LsrB in *S. typhi*. The results showed that all three compounds were able to bind to the target proteins through hydrogen, hydrophobic, and electrostatic interactions. Carvacrol exhibited the strongest binding energy (-177.5 Kcal/mol) against *E. coli*, while thymoquinone showed the strongest binding energy (-186.0 Kcal/mol) against *S. typhi*. Furthermore, this study revealed the potential of these ligands to inhibit resistant *Salmonella typhi*, suggesting their possible use in addressing bacterial resistance issues in food contamination. These findings still require further *in vitro* and *in vivo* investigation. This research provides important insights for the development of natural antibacterial agents in the food industry, particularly in preventing contamination by pathogenic bacteria and enhancing food safety.

© Politeknik Negeri Ketapang

Lipida: Jurnal Teknologi Pangan dan Industri Pertanian
<http://www.jurnal.politap.ac.id/lipida>
ISSN 2776-4044 (Online)
Email: lipida.jurnal@politap.ac.id

Keamanan pangan merupakan poin yang sangat penting dan perlu diperhatikan dalam menjaga kesehatan masyarakat. Permasalahan utama dari keamanan pangan adalah kontaminasi patogen *foodborne disease* (Dewi, Hubeis, dan Cahyadi 2019). *Foodborne disease* adalah penyakit yang disebabkan karena kontaminasi makanan oleh mikroorganisme ataupun zat kimia berbahaya. Mikroorganisme memiliki faktor virulensi sehingga mampu menginfeksi dan menimbulkan masalah kesehatan bagi manusia. Oleh karena itu, kontaminasi makanan oleh mikroba dapat menimbulkan gangguan kesehatan yang fatal. Mikroorganisme yang paling banyak ditemui menjadi penyebab utama kontaminasi adalah bakteri dan fungi termasuk bakteri seperti *Escherichia coli* dan *salmonella* (Hamad 2012).

Bakteri *Escherichia coli* dan *salmonella* merupakan 2 mikroorganisme yang menjadi banyak perhatian. *Escherichia coli* dapat menimbulkan penyakit diare. *Salmonella* banyak ditemukan pada daging unggas, daging sapi, telur, makanan dan hasil laut. Bakteri ini adalah salah satu bakteri yang sering digunakan sebagai indikator baik buruk atau aman tidaknya komoditas telur segar dan daging beku (Mamuaja 2016). Bakteri tersebut dapat menyebabkan gejala penyakit salmonellosis diantaranya diare, sakit kepala, demam enterik, dan darah pada. Gejala tersebut dapat berlangsung selama 4 hingga 7 hari dan dapat berakibat fatal seperti kematian (Sinaga dan Sembiring 2016). Kesadaran masyarakat akan pentingnya keamanan pangan yang bebas dari kontaminasi patogen menyebabkan banyak munculnya inovasi anti mikroba alami. Masyarakat mulai beralih pada penggunaan antimikroba alami karena minimnya efek samping. Salah satu contoh antimikroba alami adalah minyak esensial.

Minyak esensial merupakan salah satu jenis minyak volatile yang dihasilkan dari metabolisme sekunder tumbuhan contohnya daun, biji, bunga, kulit kayu, buah-buahan dan akar atau rimpang. Minyak esensial berstatus GRAS (*Generally Recognized as Safe*) oleh karena itu aman apabila digunakan pada produk pangan (Tajkarimi, Ibrahim, dan Cliver 2010). Pengembangan minyak esensial sebagai pengawet ataupun antimikroba memiliki potensi besar karena memiliki spektrum yang luas terhadap banyak patogen (Oussalah dkk. 2006). Salah satu bagian tumbuhan yang dapat menghasilkan minyak esensial oil adalah jantan hitam. Kandungan jantan hitam salah satunya yaitu minyak volatile. Jantan hitam mengandung timokuinon (2-isopropil-5-metil-1,4-benzokuinon), timol (2-isopropil-5-metilfenol) dan karvakrol (5-isopropil-2-metilfenol) (Soliman dkk. 2020). Minyak volatile tersebut memiliki daya hambat pertumbuhan bakteri dan fungi (Suherman, Hernawati, dan Putra 2023).

Penelitian ini bertujuan untuk melihat perbandingan 3 senyawa dari jantan hitam dalam menghambat aktivitas bakteri *E.coli* dan *Salmonella*. Uji pendahuluan yang dapat dilakukan adalah metode *molecular docking*. Metode tersebut adalah metode desain untuk memvisualisasikan interaksi molekuler. Metode *in silico* juga memprediksi pengikatan serta afinitas antara reseptor dan ligan (Fan, Fu, dan Zhang 2019). Kelebihan dari metode ini adalah lebih murah dan cepat dalam memperkirakan hasil sebelum diuji secara *in vitro* (Nur dan Slamet 2023).

METODE PENELITIAN

Persiapan Ligan dan Protein Target

Ligan timokuinon, timol dan karvakrol di peroleh dari database <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> (CID: 1028, 6989 dan 10364). Protein target *Escherichia coli* (ID: 6f86) dan *Salmonella thypi* (ID: 5gta) diperoleh dari pusat data *Protein Data Bank* (PDB) dengan alamat <http://www.rcsb.org>. Ligan timokuinon, timol dan karvakrol diminimalisir energinya menggunakan perangkat lunak *PyRx virtual screening program Open Babel tool*. Sedangkan *Discovery Studio Client 4.1* digunakan untuk menghilangkan molekul air yang berikatan dengan protein target. Perangkat lunak *PyRx* mengubah ligan timokuinon, timol dan karvakrol dari bentuk file SDF kedalam bentuk PDB format.

Uji In Silico (Molecular Docking)

Uji *in silico* untuk mengetahui interaksi ligan dan protein target dengan perangkat lunak *molecular docking HEX 8.0.0*. Hasil docking divisualisasi dan dianalisis dengan perangkat lunak *Discovery Studio Client 4.1*. Analisis yang dikaji adalah interaksi yang terjadi berupa ikatan hidrogen dan hidrofobik, energi ikat yang terbentuk serta residu asam amino protein target yang terikat dengan ligan. Konfirmasi protein target antibakteri dilakukan dengan analisis pada database algoritma melalui <https://www.way2drug.com/passonline/> untuk mengetahui spesifikasi bakteri yang dapat dihambat oleh senyawa ligan.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa aktif jinten hitam yaitu timokuinon, timol dan karvakrol sebagai antibakteri melalui uji *molecular docking* terhadap protein target *Escherichia coli* (*E.coli*) dan *Salmonella*. Sebelum dilakukan analisis interaksi ligan dan protein target, ketiga ligan dikarakterisasi menggunakan *SwissADME* untuk mengetahui sifat fisikokimia, lipofilisitas, kelarutan dalam air, serta farmakokinetik yang ditunjukkan pada Tabel 1 menunjukkan bahwa ketiga ligan tersebut sesuai dengan lima parameter Lipinski, diantaranya yaitu memiliki bobot molekul ≤ 500 Da, nilai $\log P$ 0–5, donor hidrogen ≤ 5 , akseptor hidrogen ≤ 10 , dan nilai refraktivitas molar 40–130 (Lipinski 1997).

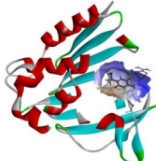
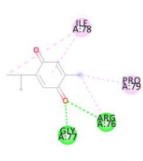
Tabel 1. Karakteristik fisikokimia, lipofilisitas, kelarutan dalam air dan farmakokinetik senyawa ligan timokuinon, timol dan karvakrol dengan *SwissADME prediction*.

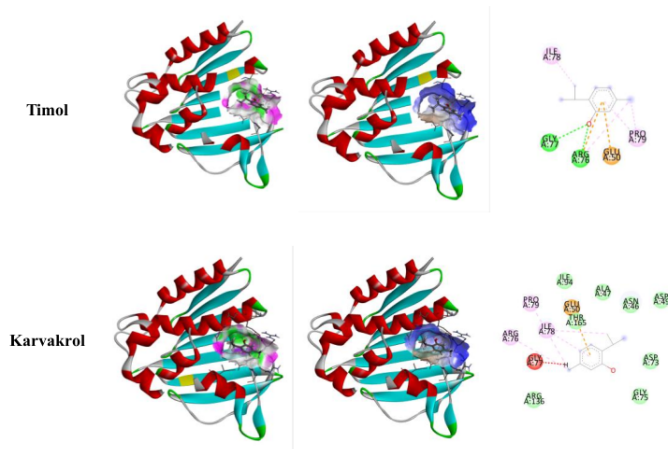
Karakteristik	Parameter	^{a)} Timokuinon (C10H12O2)	^{b)} Timol (C10H14O)	^{c)} Karvakrol (C10H14O)
Fisikokimia	Berat Molekul (g/mol)	164,20 g/mol	150,22 g/mol	150,22 g/mol
	Berat Atom	12	11	11
	Akseptor Ikatan-H	2	1	1
	Donor Ikatan-H	0	1	1
	Refraktivitas Molar	47,57	48,01	48,01
Lipofilisitas	Log P_{ow}	1,85	2,80	2,82
	Log S (ESOL)	Soluble	Soluble	Soluble
Farmakokinetik	Penyerapan GI	Tinggi	Tinggi	Tinggi
	Log Kp	-5,74 cm/s	-4,87 cm/s	-4,74 cm/s

(Sumber : Data primer diolah, 2025)

Hasil uji *in silico* melalui *molecular docking* divisualisasi secara 2D dan 3D untuk mengetahui interaksi antara ligan dan protein target. Parameter yang diamati adalah interaksi yang terjadi berupa ikatan hidrogen dan hidrofobik, energi ikat yang terbentuk serta residu asam amino protein target yang terikat dengan ligan yang ditunjukkan pada Tabel 2 dan Tabel 4. Uji *molecular docking* yang dilakukan pada dua protein target yang dipilih berdasarkan peranannya dalam kelangsungan hidup bakteri. Pada *E.coli*, protein target yang dipilih adalah *GyraseB*, yang merupakan bagian dari enzim *DNA gyrase* yang berperan penting dalam proses replikasi DNA dan pemeliharaan struktur DNA pada bakteri. Tabel 2 menunjukkan struktur 2D dan 3D interaksi ligan dengan protein target *E.coli GyraseB* dengan ikatan hidrogen, hidrofobik yang terbentuk antara ligan (timokuinon, timol, dan karvakrol) dengan residu asam amino pada protein target.

Tabel 2. Struktur 2D dan 3D interaksi ligan dengan protein target *E.coli* hasil *molecular docking*.

Senyawa	Interaksi Ikatan Hidrogen	Hidrofobisitas	Ikatan Ligan-Asam Amino Protein Target
Timokuinon			



(Sumber : Data primer diolah, 2025)

Ikatan asam amino protein target yang terikat pada ligan dapat ditunjukkan dari visualisasi 2D. Terdapat lebih dari 4 asam amino protein target yang berhasil diikat oleh ligan timokuinon, timol dan karvakrol. Pada GyraseB, interaksi yang terjadi antara timokionon dan residu asam amino (Arg76 dan Gly77) yang terlibat dalam pembentukan ikatan hidrogen dan (Ile78, Arg76 dan Pro79) melalui interaksi hidrofobik dengan energi ikat sebesar -169,5 Kkal/mol yang ditunjukkan pada Tabel 3. Interaksi ikatan hidrogen dan hifrofobik pada ligan timol memiliki keasamaan asam amino dengan ligan timokuinon, yang membedakan yaitu adanya interaksi elektrostatis yang dihasilkan pada residu asam amino (Arg76 dan Glu50) dengan energi total seluruh ikatan sebesar -171,0 Kkal/mol. Pada ligan karvakrol tidak memiliki interaksi ikatan hidrogen dengan protein target, hanya terdapat ikatan hidrofobik pada (Ile78, Arg76 dan Pro79) serta ikatan elektrostatis pada (Glu50). Namun hasil interaksi karvakrol dengan protein target memiliki nilai energi ikat terkecil yaitu -177,5 Kkal/mol dibandingkan dengan kedua ligan lainnya. Hal tersebut menunjukkan bahwa ikatan antara ligan karvakrol dengan protein target memiliki ikatan yang paling kuat dibanding dua senyawa lainnya.

Tahap *molecular docking* protein target *Escherichia coli* menunjukkan ketiga senyawa berinteraksi dengan residu asam amino yang sama dengan *native* ligan. Hal ini mengindikasikan bahwa senyawa-senyawa tersebut memiliki kemampuan untuk berkompetisi dengan *native* ligan dalam berikatan dengan protein target (Trott dan Olson 2010). Analisis energi ikatan menunjukkan bahwa karvakrol memiliki energi ikatan yang paling kecil (nilai ΔG lebih negatif) dibandingkan dengan timokuinon dan timol. Energi ikatan yang lebih kecil menunjukkan afinitas yang lebih kuat terhadap protein target, sehingga karvakrol memiliki potensi penghambatan yang lebih besar terhadap *Escherichia coli*. Bakteri ini merupakan salah satu patogen utama penyebab keracunan makanan dan penyakit bawaan makanan, sehingga temuan ini memiliki implikasi penting untuk keamanan pangan (Kumar dkk. 2018).

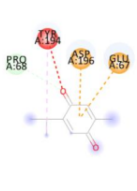
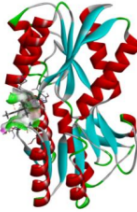
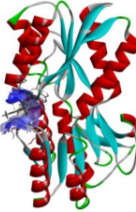
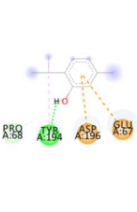
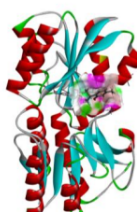
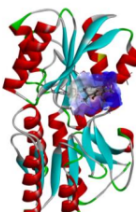
Tabel 3. Interaksi ligan dengan asam amino protein target *E.coli*.

Senyawa Ligan	Interaksi Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Elektrostatis	Energi Ikatan ΔG (Kkal/mol)
Timokuinon	ARG76, GLY77	ILE78, ARG76, PRO79	-	-169,5
Timol	ARG76, GLY77	ILE78, ARG76, PRO79	ARG76, GLU50	-171,0
Karvakrol	-	ILE78, ARG76, PRO79	GLU50	-177,5

(Sumber : Data primer diolah, 2025)

Penghambatan *Salmonella typhi*, protein target yang dipilih adalah LsrB, yang berperan dalam mekanisme quorum sensing yang mengatur ekspresi gen virulensi dan pembentukan biofilm. Penghambatan LsrB dapat mengurangi kemampuan bakteri untuk beradaptasi dan bertahan hidup dalam tubuh inang, serta mengurangi virulensi dan pembentukan biofilm yang melindungi bakteri dari serangan sistem kekebalan tubuh (Miller dkk. 2004).

Tabel 4. Struktur 2D dan 3D interaksi ligan dengan protein target *Salmonella* hasil *molecular docking*.

Senyawa	Interaksi Ikatan Hidrogen	Hidrofobisitas	Ikatan Ligan-Asam Amino Protein Target
Timokuinon			
Timol			
Karvakrol			

(Sumber : Data primer diolah, 2025)

Tabel 4 menyajikan struktur 2D dan 3D interaksi ligan dengan LsrB, yang menunjukkan bahwa ketiga senyawa aktif dapat berikatan dengan protein target melalui interaksi hidrogen dan interaksi hidrofobik dengan residu asam amino pada protein target. Interaksi ini menunjukkan bahwa timokionon, timol, dan karvakrol dapat menghambat proses quorum sensing pada *Salmonella*, yang berpotensi mengurangi patogenesis bakteri.

Tabel 5. Interaksi ligan dengan asam amino protein target *Salmonella*.

Senyawa Ligan	Interaksi Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Elektrostatik	Energi Ikatan ΔG (Kkal/mol)
Timokuinon	PRO68	TYR194	GLU67, ASP196	-186,0
Timol	TYR194, PRO68	TYR194	GLU67, ASP196	-180,4
Karvakrol	LYS175	PRO162, LYS172, LYS175, PHE192	LYS172, LYS175	-178,3

(Sumber : Data primer diolah, 2025)

Nilai energi ikatan yang dihasilkan dari interaksi ketiga senyawa dengan protein target *Salmonella typhi* lebih kecil dibandingkan dengan energi ikatan pada *Escherichia coli*. Hal ini menunjukkan bahwa ketiga senyawa memiliki afinitas yang lebih kuat terhadap protein target *Salmonella typhi*, yang mengindikasikan potensi penghambatan yang lebih besar terhadap bakteri tersebut. *Salmonella typhi* merupakan patogen penyebab demam tifoid dan sering dikaitkan dengan kontaminasi makanan, sehingga temuan ini relevan untuk aplikasi dalam keamanan pangan (Pissuwan dkk. 2020). Energi ikat -186,0 Kkal/mol pada interaksi timokuinon dan protein target *Salmonella typhi* pada residu asam amino (Pro68, Tyr194, Glu67 dan Asp196), timol memiliki energi ikat lebih besar dibanding timokuinon yaitu sebesar -180,4 Kkal/mol pada residu asam amino (Tyr194, Pro68, Tyr194, Glu67 dan Asp196) dan interaksi karvakrol dengan energi ikat -178,3 Kkal/mol, lebih besar dibanding dari dua senyawa lainnya. Interaksi karvakrol dengan protein target *Salmonella typhi* pada asam amino (Lys175, Pro162, Lys172 dan Phe192) melalui ikatan hidrogen, hidrofobik dan elektrostatis.

Pada hasil penghambatan protein bakteri *Salmonella typhi*, ketiga senyawa menunjukkan adanya interaksi dengan residu asam amino pada protein target, meskipun ikatan tersebut tidak terjadi pada situs yang sama dengan *native* ligan yaitu pada residu asam amino (Asp116, Asp166, Gln167, Asp221, Ala222, Pro220 dan Phe41). Hal ini mengindikasikan bahwa mekanisme penghambatan ketiga senyawa mungkin terjadi melalui interaksi pada sisi aktif lain yang berbeda dari situs pengikatan *native* ligan (Morris dkk. 2009). Visualisasi 2D dan 3D menunjukkan adanya berbagai jenis ikatan, termasuk ikatan hidrogen, ikatan hidrofobik, dan ikatan elektrostatis antara senyawa ligan dengan protein target *Salmonella typhi*, khususnya pada protein LrsB. Interaksi ini memperkuat hipotesis bahwa ketiga senyawa dapat menghambat aktivitas *Salmonella typhi* melalui mekanisme yang berbeda dari *native* ligan. Hal ini juga dikonfirmasi dari hasil analisis ligan timokuinon, timol dan karvakrol melalui algoritma *Way2drug PASSprediction* yang ditunjukkan pada Tabel 6 dengan analisis target sebagai aktivitas antibakteri.

Tabel 6. Prediksi aktivitas antibakteri senyawa ligan timokuinon, timol dan karvakrol dengan algoritma *PASSprediction*.

Senyawa	Bakteri Target Hambat	ChEMBL ID	Confidence (Interaksi)
Timokuinon	<i>Salmonella enterica subsp. Enterica</i>	CHEMBL613044	0.2253
	<i>Salmonella typhi</i>	CHEMBL614448	0.0397
	RESISTANT <i>Salmonella enterica subsp. Enterica</i>	CHEMBL613044	0.0946
	<i>Yersinia pestis</i>	CHEMBL614597	0.5663
	<i>Bacillus subtilis subsp. subtilis</i>	CHEMBL613315	0.3873
	<i>Staphylococcus simulans</i>	CHEMBL612425	0.3716
	<i>Corynebacterium jeikeium</i>	CHEMBL613351	0.2348
	RESISTANT <i>Burkholderia pseudomallei</i>	CHEMBL3140323	0.2335
	<i>Salmonella enterica subsp. enterica</i>	CHEMBL613044	0.1977
	<i>Salmonella typhi</i>	CHEMBL614448	0.0860
Timol	RESISTANT <i>Salmonella enterica subsp. enterica</i>	CHEMBL613044	0.0391
	<i>Yersinia pestis</i>	CHEMBL614597	0.5538
	<i>Bacillus subtilis subsp. subtilis</i>	CHEMBL613315	0.4726

	<i>Staphylococcus simulans</i>	CHEMBL612425	0.4873
	<i>Pseudomonas fluorescens</i>	CHEMBL612500	0.3575
	<i>RESISTANT Mycobacterium bovis</i>	CHEMBL613086	0.1574
	<i>Streptococcus mutans</i>	CHEMBL612426	0.2563
	<i>Salmonella enterica</i> subsp. <i>enterica</i>	CHEMBL613044	0.1977
	<i>Salmonella typhi</i>	CHEMBL614448	0.0706
	<i>RESISTANT Salmonella enterica</i> subsp. <i>enterica</i>	CHEMBL613044	0.0391
	<i>Yersinia pestis</i>	CHEMBL614597	0.4581
Karvakrol	<i>Bacillus subtilis</i> subsp. <i>subtilis</i>	CHEMBL613315	0.4525
	<i>Staphylococcus simulans</i>	CHEMBL612425	0.4873
	<i>Pseudomonas fluorescens</i>	CHEMBL612500	0.4073
	<i>Bacillus thuringiensis</i>	CHEMBL614959	0.1990
	<i>RESISTANT Burkholderia pseudomallei</i>	CHEMBL3140323	0.2368
	<i>Vibrio parahaemolyticus</i>	CHEMBL614403	0.1921

(Sumber : Data primer diolah, 2025)

Hasil analisis aktivitas biologis menggunakan PASS (*Prediction of Activity Spectra for Substances*) menunjukkan bahwa ketiga senyawa (timokuinon, timol, dan karvakrol) memiliki potensi sebagai agen penghambat terhadap jenis bakteri *Salmonella* resisten. Hal ini membuktikan bahwa ketiga senyawa ini berpotensi menghambat aktivitas bakteri melalui interaksi pada sisi aktif lain (Filimonov et al., 2014). Temuan ini memberikan wawasan baru dalam pengembangan bahan antibakteri alami untuk keamanan pangan, terutama dalam mengatasi masalah resistensi pada bakteri patogen yang sering mencemari makanan.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian, dapat disimpulkan bahwa timokuinon, timol, dan karvakrol memiliki potensi sebagai agen antibakteri alami untuk aplikasi dalam keamanan pangan, khususnya dalam mengendalikan bakteri patogen seperti *Escherichia coli* dan *Salmonella typhi* yang sering menjadi penyebab penyakit bawaan makanan. Energi ikatan yang lebih kecil pada *Salmonella typhi* dibandingkan dengan *Escherichia coli* menunjukkan afinitas yang lebih kuat. Penelitian ini memberikan wawasan baru dalam pengembangan bahan antibakteri alami dari *Nigella sativa* khususnya senyawa timokuinon, timol dan karvakrol pada penghambatan pada bakteri *Salmonella typhi* dengan pengikatan disisi aktif yang lain. Hal ini dapat menjadi dasar dalam penelitian dan kajian lebih lanjut melalui *in vitro* maupun *in vivo* untuk meningkatkan keamanan pangan dan mencegah kontaminasi bakteri patogen dengan dalam industri pangan.

Daftar Pustaka

- Dewi, Ani Rahayuni Ratna, Musa Hubeis, dan Eko Ruddy Cahyadi. 2019. "Strategi Peningkatan Mutu dan Keamanan Pangan Olahan Pertanian Melalui Penerapan Good Manufacturing Practices pada UMKM Berdaya Saing di Kota Bandung." *MANAJEMEN IKM: Jurnal Manajemen Pengembangan Industri Kecil Menengah* 14 (2): 127–33. <https://doi.org/10.29244/mikm.14.2.127-133>.
- Fan, Jiyu, Ailing Fu, dan Le Zhang. 2019. "Progress in Molecular Docking." *Quantitative Biology* 7 (2): 83–89. <https://doi.org/10.1007/s40484-019-0172-y>.
- Hamad, Siddig Hussein. 2012. "Factors Affecting the Growth of Microorganisms in Food." Dalam *Progress in Food Preservation*, disunting oleh Rajeev Bhat, Abd Karim Alias, dan Gopinadhan Paliyath, 1 ed., 405–27. Wiley. <https://doi.org/10.1002/9781119962045.ch20>.
- Kumar, Sudhir, Glen Stecher, Michael Li, Christina Knyaz, dan Koichiro Tamura. 2018. "MEGA X: Molecular Evolutionary Genetics Analysis across Computing Platforms." Disunting oleh Fabia Ursula Battistuzzi. *Molecular Biology and Evolution* 35 (6): 1547–49. <https://doi.org/10.1093/molbev/msy096>.
- Mamuaja, Christine F. Mamuja. 2016. *PENGAWASAN MUTU DAN KEAMANAN PANGAN*. 1 ed. UNSRAT PRESS.
- Miller, Stephen T., Karina B. Xavier, Shawn R. Campagna, Michiko E. Taga, Martin F. Semmelhack, Bonnie L. Bassler, dan Frederick M. Hughson. 2004. "Salmonella

- Typhimurium Recognizes a Chemically Distinct Form of the Bacterial Quorum-Sensing Signal AI-2." *Molecular Cell* 15 (5): 677–87. <https://doi.org/10.1016/j.molcel.2004.07.020>.
- Morris, Garrett M., Ruth Huey, William Lindstrom, Michel F. Sanner, Richard K. Belew, David S. Goodsell, dan Arthur J. Olson. 2009. "AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated Docking with Selective Receptor Flexibility." *Journal of Computational Chemistry* 30 (16): 2785–91. <https://doi.org/10.1002/jcc.21256>.
- Nur, Achmad Vandian, dan Slamet Slamet. 2023. "Molecular Docking Metabolit Sekunder Buah Buasbuas (*Premna Pubescens* Blume) sebagai Antiinflamasi pada aterosklerosis: Pendekatan In-Silico." *INPHARMED Journal (Indonesian Pharmacy and Natural Medicine Journal)* 6 (2): 73. <https://doi.org/10.21927/inpharmed.v6i2.2653>.
- Oussalah, Mounia, Stéphane Caillet, Linda Saucier, dan Monique Lacroix. 2006. "Antimicrobial Effects of Selected Plant Essential Oils on the Growth of a *Pseudomonas Putida* Strain Isolated from Meat." *Meat Science* 73 (2): 236–44. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2005.11.019>.
- Pissuwan, Dakrong, Camilla Gazzana, Skorn Mongkolsuk, dan Michael B. Cortie. 2020. "Single and Multiple Detections of Foodborne Pathogens by Gold Nanoparticle Assays." *WIREs Nanomedicine and Nanobiotechnology* 12 (1): e1584. <https://doi.org/10.1002/wnan.1584>.
- Sinaga, Mikha Dayan, dan Nita Sari Br. Sembiring. 2016. "Penerapan Metode Dempster Shafer Untuk Mendiagnosa Penyakit Dari Akibat Bakteri *Salmonella*." *Cogito Smart Journal* 2 (2): 94–107. <https://doi.org/10.31154/cogito.v2i2.18.94-107>.
- Soliman, Rabab M., Randa A. Abdel Salam, Basma G. Eid, Ahdab Khayyat, Thikryat Neamatallah, Mostafa K. Mesbah, dan Ghada M. Hadad. 2020. "Stability Study of Thymoquinone, Carvacrol and Thymol Using HPLC-UV and LC-ESI-MS." *Acta Pharmaceutica* 70 (3): 325–42. <https://doi.org/10.2478/acph-2020-0028>.
- Suherman, Ade Wina Utari, Diana Hernawati, dan Rinaldi Rizal Putra. 2023. "Analisis In Silico : Aktivitas Senyawa Antibakteri dalam *Zingiber aromaticum* terhadap *Salmonella typhi*." *Bioscientist : Jurnal Ilmiah Biologi* 11 (1): 620. <https://doi.org/10.33394/bioscientist.v11i1.7636>.
- Tajkarimi, M.M., S.A. Ibrahim, dan D.O. Cliver. 2010. "Antimicrobial Herb and Spice Compounds in Food." *Food Control* 21 (9): 1199–1218. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2010.02.003>.
- Trott, Oleg, dan Arthur J. Olson. 2010. "AutoDock Vina: Improving the Speed and Accuracy of Docking with a New Scoring Function, Efficient Optimization, and Multithreading." *Journal of Computational Chemistry* 31 (2): 455–61. <https://doi.org/10.1002/jcc.21334>.

Potensi Senyawa Timokuinon

ORIGINALITY REPORT

17%	13%	7%	6%
SIMILARITY INDEX	INTERNET SOURCES	PUBLICATIONS	STUDENT PAPERS

PRIMARY SOURCES

1	ojs.uajy.ac.id Internet Source	4%
2	Submitted to Politeknik Negeri Cilacap Student Paper	3%
3	journal.ipb.ac.id Internet Source	1%
4	etheses.uin-malang.ac.id Internet Source	1%
5	repo.unsrat.ac.id Internet Source	1%
6	Submitted to Institut Pertanian Bogor Student Paper	1%
7	www.neliti.com Internet Source	1%
8	repository.stikesdrsoebandi.ac.id Internet Source	1%
9	publikasi.polije.ac.id Internet Source	1%
10	Nelspon Gazpersz, Rahma El, Muhammad Daswar Ardian Baharudin, Zulaika Izmatul Hawa Bastio et al. "Molecular Docking Senyawa Aktif Ekstrak Daun Melinjo (Gnetum gnemon) dalam Penghambatan Enzim Histidin Dekarboksilase", KOVALEN: Jurnal Riset Kimia, 2024 Publication	<1%

11	Nur Cholis Endriyatno, Muhammad Walid. "Studi In Silico Kandungan Senyawa Daun Srikaya (<i>Annona squamosa</i> L.) Terhadap Protein Dihydrofolate Reductase Pada <i>Mycobacterium tuberculosis</i> ", <i>Pharmacon: Jurnal Farmasi Indonesia</i> , 2022 Publication	<1 %
12	Maocha, Izamara Gomes. "Desenvolvimento de Formulasoes para Entrega de Farmacos para o Tratamento de Lesoes Cancerigenas Provocadas Pelo Virus do Papiloma Humano (HPV)", <i>Universidade da Beira Interior (Portugal)</i> , 2022 Publication	<1 %
13	edoc.pub Internet Source	<1 %
14	jurnal.ucy.ac.id Internet Source	<1 %
15	jurnalbiologi.perbiol.or.id Internet Source	<1 %
16	Jonathan Cavin Ezra Sinaga, Maureen Kumaunang, Paulix Tuther. "Studi In Silico : Aktivitas Antibakteri Senyawa Resveratrol Terhadap Bakteri <i>Salmonella typhi</i> Penyebab Demam Tifoid", <i>CHEMISTRY PROGRESS</i> , 2024 Publication	<1 %
17	Rafika Sari, Lia Deslianri, Pratiwi Apridamayanti. "Skrining Aktivitas Antibakteri Bakteriosin dari Minuman Ce Hun Tiau", <i>Pharmaceutical Sciences and Research</i> , 2016 Publication	<1 %
18	core.ac.uk Internet Source	<1 %
19	docplayer.info Internet Source	<1 %

<1 %

20

repository.ub.ac.id
Internet Source

<1 %

21

www.dovepress.com
Internet Source

<1 %

22

Theresia Nona Elfi, Yohanes Nong Bunga,
Yohanes Bare. "STUDI AKTIVITAS BIOLOGI
SECARA IN SILICO SENYAWA NONIVAMIDE
DAN NORDIHYDROCPSAICIN SEBAGAI ANTI
INFLAMASI", Florea : Jurnal Biologi dan
Pembelajarannya, 2021
Publication

<1 %

Exclude quotes Off

Exclude matches Off

Exclude bibliography On

Potensi Senyawa Timokuinon

GRADEMARK REPORT

FINAL GRADE

/0

GENERAL COMMENTS

PAGE 1

PAGE 2

PAGE 3

PAGE 4

PAGE 5

PAGE 6

PAGE 7

PAGE 8