SKRIPSI

UJI *IN SILICO* EKSTRAK ETANOL DAUN PEGAGAN (*Centella asiatica* L.) YANG BERPOTENSI SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR ANDROGEN PADA JERAWAT

ANDI BESSE INTAN CANTIKA

D1B324067

PROGRAM STUDI SARJANA FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS MEGAREZKY

MAKASSAR

2025

SKRIPSI

UJI *IN SILICO* EKSTRAK ETANOL DAUN PEGAGAN (*Centella asiatica* L.) YANG BERPOTENSI SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR ANDROGEN PADA JERAWAT

Disusun dan diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

ANDI BESSE INTAN CANTIKA

D1B324067

PROGRAM STUDI SARJANA FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS MEGAREZKY

MAKASSAR

2025

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama	:	Andi Besse Intan Cantika
NIM	:	D1B324067
Tempat/Tanggal Lahir	:	Katonantana, 14 September 2001
Program Studi	:	S1 Farmasi
Judul Skripsi	:	UJI *IN SILICO* EKSTRAK ETANOL DAUN PEGAGAN (*Centella asiatica* L.) YANG BERPOTENSI SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR ANDROGEN PADA JERAWAT

Menyatakan bahwa skripsi ini adalah hasil karya sendiri dan bukan plagiat, apabila di dalam skripsi ini ternyata ditemukan unsur plagiat, maka saya siap mendapatkan sanksi akademik yang terkait dengan hal tersebut.

Makassar, Agustus 2025

Andi Besse Intan Cantika

HALAMAN PERSETUJUAN

Skripsi dengan judul:

UJI *IN SILICO* EKSTRAK ETANOL DAUN PEGAGAN (*Centella asiatica* L.) YANG BERPOTENSI SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR ANDROGEN PADA JERAWAT

Telah disetujui untuk dipertahankan di hadapan

Tim Penguji Skripsi

Fakultas Farmasi Universitas Megarezky

Pada hari Rabu tanggal 13 Agustus 2025

Pembimbing I	Pembimbing II
(Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si.)	(Surya Syarifuddin, S.KM., M.Kes.)
NIDN: 09 220291 02	NIDN: 09 291086 03

Mengetahui,
Ketua Program Studi

(Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si.)
NIDN: 09 220291 02

HALAMAN PENGESAHAN

Pada hari ini Rabu tanggal 13 bulan Agustus tahun 2025, bertempat di Ruang Meeting Prodi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi Universitas Megarezky, telah dilaksanakan Ujian Skripsi sebagai salah satu syarat untuk menyelesaikan pendidikan Program Sarjana Farmasi terhadap mahasiswa atas nama:

Nama : Andi Besse Intan Cantika

NIM : D1B324067

Program Studi : Farmasi

Jenjang : Strata I

Judul Skripsi : UJI *IN SILICO* EKSTRAK ETANOL DAUN PEGAGAN (*Centella asiatica* L.) YANG BERPOTENSI SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR ANDROGEN PADA JERAWAT

Yang telah diuji oleh **Tim Penguji SKRIPSI**, sebagai berikut:

Tim Penguji	**Tanda Tangan**
1. Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si.	(.....)
2. Surya Syarifuddin, S.KM., M.Kes.	(.....)
3. apt. Wahyuni, S.Farm., M.Farm.	(.....)

Mengetahui,

Dekan,	Ketua Program Studi
(Dr. apt. Besse Yuliana, S.Si., M.Si.)	(Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si.)
NIDN: 09 231179 01	NIDN: 09 210991 02

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Subhanahu Wa Ta'ala karena atas rahmat dan karunia-Nya, penulis dapat menyelesaikan Skripsi ini yang berjudul:

"UJI *IN SILICO* EKSTRAK ETANOL DAUN PEGAGAN (*Centella asiatica* L.) YANG BERPOTENSI SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR ANDROGEN PADA JERAWAT"

Penyusunan karya tulis ini merupakan salah satu syarat dalam menyelesaikan Program Sarjana Farmasi pada Fakultas Farmasi, Universitas Megarezky Makassar. Penulis menyadari bahwa tanpa bimbingan, bantuan, dan dukungan dari berbagai pihak, karya tulis ini tidak akan dapat terselesaikan dengan baik.

Dengan penuh rasa hormat dan cinta, penulis menyampaikan ucapan terima kasih yang tak terhingga kepada kedua orang tua tercinta ayahku **Drs. Syamsu Alam** dan opuku **Hawati**, serta adekku **Andi Puji Widyastuti**, yang senantiasa mendoakan, mendampingi, serta memberikan semangat, kasih sayang, dan dukungan moril maupun materil tanpa henti. Tanpa keikhlasan dan doa dari Ayah, Ibu, dan Adik penyusunan Skripsi ini tidak akan pernah terwujud.

Ucapan terima kasih dan penghargaan yang sebesar-besarnya juga penulis sampaikan kepada:

1. **Bapak Dr. H. Alimuddin, SH., MH., M.Kn sebagai Pembina Yayasan Pendidikan Islam Mega Rezky Makassar**, atas arahan dan pembinaan yang senantiasa menjadi fondasi dalam pengembangan institusi dan mahasiswa.
2. **Ibu Alm. Hj. Suryani, SH., MH sebagai Pendiri Yayasan Pendidikan Islam Mega Rezky Makassar**, atas dedikasi dan kontribusi luar biasa dalam mendirikan lembaga pendidikan yang menjadi wadah pengembangan ilmu dan karakter.
3. **Bapak Moch. Noer Alim Qolby, S.H., LLM Sebagai Ketua Yayasan Pendidikan Islam Mega Rezky Makassar**, atas dukungan dan kebijakan

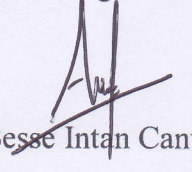
strategis yang memfasilitasi proses pendidikan dan penelitian secara berkelanjutan.

4. **Bapak Prof. Dr. Anwar Ramli, SE., M.Si sebagai Rektor Universitas Megarezky**, atas motivasi dan arahannya dalam membangun budaya akademik yang unggul dan berdaya saing.
5. **Ibu Dr. apt. Besse Yuliana, S.Si., M.Si.**, sebagai **Dekan Fakultas Farmasi**, atas kesempatan dan dukungan yang diberikan selama masa studi.
6. **Ibu Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si. sebagai Ketua Program Studi S1 Farmasi**, atas bimbingan akademik yang berkelanjutan dan inspiratif.
7. **Dosen Pembimbing Ibu Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si.** dan **Ibu Surya Syarifuddin, S.KM., M.Kes.** yang telah memberikan arahan, saran, dan evaluasi dalam penyusunan karya tulis ini dengan penuh kesabaran dan keikhlasan.
8. **Ibu Dr. apt. Nurhikma A, S.Farm., M.Si. sebagai Pembimbing Akademik (PA),** atas pendampingan dan bimbingan akademik selama masa studi penulis
9. **Seluruh Dosen dan Staf Akademik Universitas Megarezky**, atas ilmu, perhatian, dan pelayanan yang diberikan selama proses studi.
10. **Teman-teman seperjuangan mahasiswa D4 Farmasi** yang bersama-sama berjuang untuk menyelesaikan studi s1 ini serta turut membantu secara langsung maupun tidak langsung dalam penyusunan karya ilmiah ini.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan karya ilmiah ini masih terdapat banyak kekurangan. Oleh karena itu, kritik dan saran yang bersifat membangun sangat penulis harapkan demi kesempurnaan karya ini di masa mendatang.

Akhir kata, semoga karya ilmiah ini dapat memberikan manfaat bagi pembaca, serta menjadi kontribusi yang berarti dalam pengembangan ilmu pengetahuan.

Makassar, Agustus 2025



Andi Besse Intan Cantika

ABSTRAK

Andi Besse Intan Cantika (D1B324067) Uji *In Silico* Ekstrak Etanol Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) yang Berpotensi Sebagai Inhibitor Reseptor Androgen Pada Jerawat (Dibimbing oleh Nurhikma Awaluddin dan Surya Syarifuddin).

Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) merupakan salah satu tanaman yang mana bagian daunnya banyak digunakan untuk mengobati berbagai macam penyakit salah satunya adalah mengurangi dan mencegah jerawat. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui kandungan fitokimia dari Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) serta potensinya sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat melalui pendekatan *in silico*. Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) dilakukan skrining fitokimia dengan hasil memiliki kandungan senyawa alkaloid, fenolik, flavonoid, saponin dan triterpenoid. Selanjutnya senyawa yang diperoleh yaitu *indole, imidazole, catechin, naringenin, kaempferol, quercetin, centellin* dan *Asiatic acid* dilakukan *molecular docking* menggunakan *AutoDock Tool* terhadap protein target reseptor androgen dengan kode 2PIV. Hasil *docking* menunjukkan adanya potensi Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat dengan ligan uji yaitu *quercetin* (-8.4), kemudian *asiatic acid* (-6.3), *centellin* (-6.1), *catechin* (-5.9), kemudian terakhir *naringenin* (-5.7) yang berasal dari senyawa fenolik, flavonoid, saponin, dan triterpenoid.

Kata Kunci: Daun Pegagan, Skrining Fitokimia, *In Silico*, Reseptor Androgen

ABSTRACT

Andi Besse Intan Cantika (Student ID: D1B324067). *In Silico Test of Ethanolic Extract of Gotu Kola (Centella asiatica L.) Leaves as a Potential Inhibitor of Androgen Receptors in Acne (Supervised by Nurhikma Awaluddin and Surya Syarifuddin).*

Gotu Kola (Centella asiatica L.) is a plant whose leaves are widely used to treat various diseases, one of which is to reduce and prevent acne. This study aims to identify the phytochemical content of Gotu Kola (Centella asiatica L.) leaves and its potential as an inhibitor of androgen receptors in acne through an in-silico approach. The ethanolic extract of Gotu Kola leaves (Centella asiatica L.) underwent phytochemical screening and was found to contain alkaloids, phenolics, flavonoids, saponins, and triterpenoids. Subsequently, the compounds obtained—namely alkaloids, indoles, imidazoles, catechins, naringenin, kaempferol, quercetin, and asiatic acid—were tested using molecular docking with the AutoDock Tool against the androgen receptor target protein with code 2PIV.

Docking results demonstrated the potential of Gotu Kola (Centella asiatica L.) leaves as an inhibitor of androgen receptors in acne, with binding affinity values as follows: quercetin (-8.4), asiatic acid (-6.3), centellin (-6.1), catechin (-5.9), and naringenin (-5.7). These compounds are derived from phenolic, flavonoid, saponin, and triterpenoid classes.

Keywords: *Gotu Kola Leaves, Phytochemical Screening, In Silico, Androgen Receptor*

UNIVERSITAS MEGAREZKY
UNIMERZ
LEMBAGA BAHASA

DAFTAR ISI

Halaman

HALAMAN JUDUL ..... **ii**
PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI ..... **iii**
HALAMAN PERSETUJUAN ..... **iv**
HALAMAN PENGESAHAN ..... **v**
KATA PENGANTAR ..... **vi**
ABSTRAK ..... **viii**
ABSTRACT ..... **ix**
DAFTAR ISI ..... **x**
DAFTAR TABEL ..... **xii**
DAFTAR GAMBAR ..... **xiii**
DAFTAR LAMPIRAN ..... **xiv**
BAB I PENDAHULUAN **1**
A. Latar Belakang 1
B. Rumusan Masalah 3
C. Tujuan Penelitian 3
D. Manfaat Penelitian 3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA **4**
A. Uraian Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.) 4
B. Metode Ekstraksi 11
C. Skrining Fitokimia 12
D. Jerawat 13
E. Reseptor Androgen 15
F. Metode Pengujian *In Silico* 17
G. Kerangka Konsep 19
H. Hipotesis 20
BAB III METODE KERJA **21**
A. Jenis Penelitian 21
B. Waktu dan Tempat Penelitian 21
C. Populasi dan Sampel 21
D. Alat dan Bahan Penelitian 22

E. Prosedur Kerja 23
F. Pengujian *In Silico* 25
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 27
A. Hasil 27
B. Pembahasan 36
BAB V PENUTUP 47
A. Kesimpulan 47
B. Saran 47
DAFTAR PUSTAKA 48
LAMPIRAN 54

DAFTAR TABEL

Halaman

Tabel 4.1 Hasil Rendemen Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) …… 26

Tabel 4.2 Hasil Skrining Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) ……... 26

Tabel 4.3 Struktur Senyawa Ligan Uji …….. 27

Tabel 4.4 Uji Fisikokimia Ligan Uji ……. 29

Tabel 4.5 Uji ADMET Ligan Uji …….. 29

Tabel 4.6 Protein Target Inhibitor Reseptor Androgen pada Jerawat ……... 30

Tabel 4.7 Nilai RMSD *Docking* …… 30

Tabel 4.8 Hasil *Overclay Co-Crystal* Ligan dan *Redock* Ligan …… 30

Tabel 4.9 Hasil *Docking* Senyawa Uji …… 31

Tabel 4.10 Visualisasi Hasil *Docking* …… 33

DAFTAR GAMBAR

Halaman

Gambar 2.1 Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) …….. 4

DAFTAR LAMPIRAN

Halaman

Lampiran 1. Skema Kerja Penelitian ……. 54

Lampiran 2. Perhitungan Rendemen ……. 56

Lampiran 3. Dokumentasi Skrining Fitokimia …….. 57

Lampiran 4. Dokumentasi Pengujian *In Silico* ……... 60

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Indonesia dikenal sebagai salah satu negara dengan tingkat keanekaragaman hayati yang luar biasa tinggi (Maruzy dkk., 2020). Kekayaan sumber daya alam ini mencakup berbagai jenis tumbuhan yang memiliki potensi besar untuk dimanfaatkan sebagai tanaman obat (Handayani dkk., 2020).

Dalam praktik pengobatan tradisional di Indonesia, pegagan (*Centella asiatica* L.) telah lama dimanfaatkan secara turun-temurun sebagai salah satu tanaman berkhasiat obat. Di samping penggunaannya secara langsung, berbagai produk obat yang beredar di pasaran juga banyak memanfaatkan ekstrak atau bahan aktif yang berasal dari tanaman ini (Maruzy dkk., 2020). Salah satu kegunaan dari ekstrak herbal pegagan (*Centella asiatica* L.) yaitu memiliki efek yang nyata dalam mengurangi dan mencegah jerawat yang muncul (Utari, 2023).

Di Indonesia, jerawat dialami oleh sekitar 80–85% remaja berusia 15–18 tahun. Kondisi ini juga ditemukan pada 12% wanita di bawah usia 25 tahun, serta sekitar 3% pada kelompok usia 35–44 tahun. Secara umum, kasus jerawat lebih banyak dijumpai pada wanita dibandingkan pria (Azmalah, 2023). Faktor-faktor yang dapat memicu munculnya jerawat meliputi aspek genetik, perubahan hormon selama siklus menstruasi, tingkat stres, aktivitas berlebihan kelenjar sebasea, kebersihan diri, pola makan, serta penggunaan produk kosmetik. Terjadinya jerawat diawali oleh tersumbatnya pori-pori kulit, yang menghambat pengeluaran minyak. Penumpukan ini kemudian menyebabkan pembengkakan dan berkembang menjadi

jerawat (Lestari dkk., 2021). Penyebab jerawat lainnya ialah kelenjar sebasea yang mengalami pembesaran dan meningkatnya sekresi sebum diakibatkan oleh peningkatan hormon androgen (Fadilah, 2021).

Hormon yang berperan dalam munculnya jerawat ialah hormon androgen. Kadar yang tinggi dari hormon androgen dapat menyebabkan peningkatan produksi sekresi sebum meningkat, dimana hal tersebut merupakan alasan dari timbulnya jerawat (Silvia dkk., 2020).

Studi *in silico* merupakan metode pengujian yang memanfaatkan komputer beserta perangkat lunaknya. Pendekatan ini dikembangkan sebagai salah satu alternatif untuk membatasi, mengurangi, atau bahkan menggantikan penggunaan hewan dalam uji coba, sehingga dapat memberikan informasi terkait keamanan serta efektivitas suatu obat (Siagian dkk., 2022).

Penelitian sebelumnya yang dilakukan oleh (Utari, 2023) menunjukkan bahwa herbal pegagan (*Centella asiatica* L.) mempunyai khasiat positif untuk kulit sehingga bisa diekstrak dan digunakan pada kulit yang sedang berjerawat. Selain itu, telah dilakukan juga penelitian oleh (Shodiq dkk., 2022) dengan menggunakan metode *in silico* terhadap reseptor androgen pada jerawat menggunakan kulit pisang sebagai sampel.

Berdasarkan hal di atas maka akan dilakukan penelitian tentang "Uji *In Silico* Ekstrak Etanol Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) yang Berpotensi Sebagai Inhibitor Reseptor Androgen Pada Jerawat"

B. Rumusan Masalah

1. Apa saja kandungan fitokimia dari ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.)?
2. Apakah ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki potensi sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat setelah diuji secara *in silico*?

C. Tujuan Penelitian

1. Mengetahui kandungan fitokimia dari ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.)
2. Mengetahui ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki potensi sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat setelah diuji secara *in silico*

D. Manfaat Penelitian

1. Untuk Institusi

   Penelitian ini bermanfaat sebagai salah satu tambahan bahan pembelajaran yang baru untuk mahasiswa selanjutnya yang ingin melakukan penelitian di bidang yang sama

2. Untuk Peneliti

   Penelitian ini bermanfaat untuk meningkatkan kemampuan menganalisa serta memperluas wawasan peneliti guna mengetahui aktivitas ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.) sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat secara *in silico*

3. Untuk Masyarakat

   Penelitian ini bermanfaat untuk menambah wawasan masyarakat terkait kegunaan dari daun pegagan (*Centella asiatica* L.) yang dapat berpotensi sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

A. Uraian Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.)



(Gambar 2. 1 Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.))

1. Klasifikasi Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Secara ilmiah, pegagan (*Centella asiatica* L.) diketahui memiliki beragam khasiat yang dapat dimanfaatkan dalam bidang pengobatan (Maruzy dkk., 2020). Adapun klasifikasi botani dari tanaman pegagan (*Centella asiatica* L.) adalah sebagai berikut (Sulistio, 2021):

Kingdom : Plantae

Subkingdom : Tracheobionta

Super Divisi : Spermatophyta

Divisi : Magnoliophyta

Kelas : Magnoliopsida

Sub Kelas : Rosidae

Ordo : Apiales

Famili : Apiaceae

Genus : Centella

Spesies : *Centella asiatica* (L.) Urban

2. Nama Lain Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Tanaman pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki beragam sebutan lokal yang berbeda-beda di setiap daerah di Indonesia. Di Jakarta dan Aceh, tanaman ini dikenal dengan nama pegagan, sedangkan masyarakat Jawa Barat menyebutnya antanan. Di Sumatera, pegagan populer dengan sebutan daun kaki kuda, sementara di Madura disebut tikusan, dan di Bali dinamakan taiduh. Selain itu, sebutan lain yang digunakan di berbagai daerah antara lain kori-kori di Halmahera, gagan-gagan atau panigowang di Jawa, pegago di Minangkabau, dogauke, sandanan, atau gogauke di Papua, kolotidi manora di Maluku, serta babile di Lombok (Ernawati, 2023).

3. Morfologi Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Pegagan (*Centella asiatica* L.) adalah salah satu jenis tanaman yang kerap dikategorikan gulma. Daunnya memiliki bentuk menyerupai ginjal dengan bagian pangkal yang melengkung ke dalam (Sadik & Anwar, 2022). Pegagan (*Centella asiatica* L.) merupakan tanaman herba yang memiliki pertumbuhan dengan pola menjalar dengan ketinggian berkisar antara 10 hingga 30 cm. Batangnya dapat merambat di permukaan maupun sedikit di bawah tanah, menghasilkan stolon bercabang sepanjang 10 hingga 80 cm. Pada beberapa titik pertumbuhan, stolon ini membentuk akar yang kemudian berkembang menjadi anakan baru. Daunnya bersifat tunggal dengan bentuk menyerupai ginjal dan pangkal yang melengkung ke dalam, sementara tepinya bergelombang atau bergerigi halus. Tekstur daun bervariasi dari halus hingga agak kasar, berwarna hijau muda hingga hijau tua tergantung kondisi

lingkungan, serta memiliki aroma khas dan rasa segar. Daun tumbuh pada batang atau stolon dengan tangkai yang umumnya dapat mencapai panjang 20 cm. Bunganya tersusun membentuk payung, baik tunggal maupun majemuk, terdiri atas tiga hingga lima kuntum yang muncul dari ketiak daun, berwarna putih atau merah muda. Buahnya berbentuk lonjong dan pipih dengan ukuran panjang sekitar 2 hingga 2,5 mm (Ernawati, 2023).

4. Kandungan Kimia Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Pegagan (*Centella asiatica* L.) diketahui mengandung berbagai senyawa bioaktif, antara lain saponin dan triterpenoid, serta komponen kimia yang dapat dikelompokkan ke dalam beberapa golongan seperti flavonoid, minyak atsiri, asam amino, dan triterpenoid (Ritonga dkk., 2024). Selain itu, tanaman ini juga memiliki beragam senyawa lain, termasuk alkaloid, tanin, glikosida, serta kandungan saponin, flavonoid, dan triterpenoid (Sadik & Anwar, 2022).

Daun pegagan (*Centella asiatica* L.) adalah tanaman yang memiliki kemampuan untuk sebagai antibakteri seperti alkaloid, flavonoid, tanin dan saponin yang memberikan efek antibakteri (Febriyanto dkk., 2025).

a. Alkaloid

Alkaloid merupakan kelompok senyawa metabolit sekunder yang bersifat basa dan mengandung satu atau lebih atom nitrogen, biasanya berada dalam struktur cincin siklik. Senyawa ini dapat ditemukan di berbagai bagian tumbuhan, termasuk bunga, biji, daun, ranting, akar, maupun kulit batang. Alkaloid dikenal sebagai komponen aktif pada tanaman yang berperan penting sebagai obat sekaligus pengaktivasi kuat sel

imun, sehingga mampu menghancurkan bakteri, virus, jamur, bahkan sel kanker. Aktivitas antimikroba alkaloid terjadi melalui mekanisme penghambatan enzim esterase, DNA dan RNA polimerase, serta proses respirasi sel, disertai kemampuannya melakukan interkalasi pada DNA. Dalam perannya sebagai antifungi, alkaloid dapat merusak membran sel dengan cara berikatan kuat pada ergosterol, membentuk pori-pori yang menyebabkan kebocoran membran. Kondisi ini menimbulkan kerusakan permanen pada sel jamur dan berujung pada kematian sel tersebut (Maisarah dkk., 2023).

b. Fenolik

Senyawa fenolik merupakan kelompok senyawa yang banyak dijumpai pada berbagai jenis tumbuhan. Struktur senyawa ini beragam, meliputi kuinon fenolik, flavonoid, fenilpropanoid, fenol monosiklik sederhana, serta polifenol seperti tanin, lignin, dan melanin. Beberapa di antaranya juga termasuk dalam kelompok kuinon fenolik. Senyawa fenolik diketahui memiliki aktivitas sebagai antioksidan (Yulianti dkk., 2021).

c. Flavonoid

Flavonoid merupakan senyawa metabolit sekunder yang tergolong dalam kelompok fenol, dengan struktur cincin benzena yang tersubstitusi oleh gugus hidroksil (OH). Senyawa ini termasuk salah satu kelompok terbesar yang ditemukan di alam dan dapat dijumpai pada berbagai bagian tumbuhan, seperti akar, kayu, kulit batang, daun, batang, buah, hingga bunga. Diperkirakan sekitar 5–10% dari total senyawa metabolit sekunder

pada tumbuhan merupakan flavonoid. Secara farmakologis, flavonoid memiliki berbagai aktivitas, antara lain sebagai antioksidan, anti-penuaan, antiinflamasi, antivirus, dan fungsi biologis lainnya (Ningsih dkk., 2023).

Flavonoid bekerja sebagai antibakteri melalui dua mekanisme utama, yakni mengganggu fungsi membran sel dan menghambat metabolisme energi bakteri. Pada mekanisme pertama, flavonoid membentuk kompleks dengan protein ekstraseluler sehingga merusak integritas membran sel bakteri, yang kemudian diikuti keluarnya senyawa intraseluler. Sementara itu, pada mekanisme kedua, flavonoid menghambat pemanfaatan oksigen oleh bakteri, yang berakibat pada terganggunya proses biosintesis makromolekul. Karena energi diperlukan untuk pembentukan molekul kompleks, terhambatnya metabolisme membuat bakteri tidak mampu berkembang menjadi struktur molekul yang lebih kompleks (Saptowo dkk., 2022).

d. Saponin

Saponin adalah salah satu jenis metabolit sekunder yang terdapat pada tumbuhan, yang memiliki ciri khas membentuk busa stabil ketika dilarutkan dalam air dan dikocok. Dari segi farmakologi, saponin steroid diketahui memiliki khasiat untuk membantu mengatasi berbagai penyakit, seperti reumatik, anemia, diabetes, sifilis, impotensi, serta bersifat antifungi. Sementara itu, saponin triterpen diketahui berfungsi sebagai agen antibakteri, antijamur, antiinflamasi, sekaligus bekerja sebagai ekspektoran (Darma & Marpaung, 2020).

Saponin bekerja dengan cara meningkatkan permeabilitas pada membran sel, yang pada akhirnya memicu terjadinya hemolisis. Ketika senyawa ini berinteraksi dengan sel bakteri, efeknya dapat menyebabkan kerusakan pada struktur sel hingga bakteri tersebut pecah atau mengalami lisis (Saptowo dkk., 2022).

e. Triterpenoid

Triterpenoid merupakan senyawa yang tersusun dari enam unit isoprena (*2-metilbuta-1,3-diena*) yang masing-masing memiliki lima atom karbon (C5), dan berasal dari turunan hidrokarbon asiklik C30 yang dikenal sebagai skualena. Kelompok senyawa ini memiliki beragam aktivitas farmakologis penting, di antaranya sebagai antivirus, antibakteri, antiinflamasi melalui mekanisme penghambatan sintesis kolesterol, serta berpotensi sebagai agen antikanker (Hidayah dkk., 2023).

5. Manfat Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Pegagan (*Centella asiatica* L.) merupakan salah satu jenis herba dari keluarga Apiaceae atau Umbelliferae yang banyak dimanfaatkan sebagai bahan dalam industri farmasi, baik sebagai komponen tambahan maupun sebagai bahan baku pembuatan ekstrak. Pemanfaatannya dalam pengobatan tradisional telah didukung oleh uji klinis, antara lain untuk menyembuhkan luka, mengatasi borok kulit, serta mencegah terbentuknya keloid dan hipertrofi. Selain itu, konsumsi pegagan secara oral dapat digunakan untuk terapi ulkus pada lambung dan usus, serta membantu meningkatkan aliran darah menuju otak, yang

berperan dalam mengatasi penyumbatan aterosklerosis pada pembuluh darah otak di tingkat mikrosirkulasi (Burhan, 2022).

Tanaman pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki kemampuan bertindak sebagai agen antibakteri yang membantu melindungi tubuh dari serangan infeksi patogen. Selain itu, herba ini juga bermanfaat sebagai pereda nyeri, penenang alami, memiliki sifat antimikroba, serta berpotensi sebagai agen antidepresan (Ritonga dkk., 2024).

Tanaman pegagan (Centella asiatica L.) memiliki berbagai sifat farmakologis, antara lain sebagai antioksidan, antimikroba, antivirus, antitumor, antiinflamasi, antilepra (kusta), bersifat sitotoksik, neuroprotektif, serta berfungsi sebagai hepatoprotektor. Selain itu, tanaman ini dimanfaatkan dalam pengobatan beragam kondisi kesehatan, seperti radang sendi, infeksi saluran pencernaan, disentri, wasir, keputihan, asma, nyeri otot, keracunan, dan rematik. Pegagan juga diketahui bermanfaat untuk mencegah kerusakan saraf akibat stres, menunjang kinerja otak, menurunkan kadar glukosa darah, melancarkan peredaran darah, mempercepat penyembuhan luka, serta meningkatkan daya tahan tubuh, serta dimanfaatkan dalam bidang kosmetik, khususnya untuk regenerasi sel kulit dan merangsang produksi kolagen (Ernawati, 2023).

B. Metode Ekstraksi

Ekstraksi adalah teknik pemisahan suatu senyawa yang memanfaatkan perbedaan kelarutan antara dua jenis cairan yang tidak saling bercampur, umumnya melibatkan air sebagai salah satu fase dan pelarut organik sebagai fase lainnya (Badaring dkk., 2020).

Proses ekstraksi adalah metode untuk memisahkan senyawa aktif yang terdapat dalam suatu bahan atau tanaman dengan menggunakan pelarut yang sesuai. Proses ini terbagi menjadi dua jenis, yaitu ekstraksi panas dan ekstraksi dingin. Pemilihan metode ekstraksi yang diterapkan pada simplisia dapat memengaruhi jumlah ekstrak yang dihasilkan, jenis senyawa yang terserap dalam ekstrak, serta mutu dari ekstrak tersebut (Mumarli dkk., 2024).

1. Ekstraksi Dingin

   Ekstraksi dingin merupakan metode isolasi senyawa aktif yang dilakukan tanpa penerapan panas selama prosesnya. Teknik ini dipilih untuk mencegah degradasi komponen bioaktif yang sensitif terhadap suhu tinggi. Salah satu contoh penerapan metode ini adalah *maserasi*, yaitu teknik ekstraksi yang relatif sederhana dengan cara merendam serbuk simplisia ke dalam pelarut yang sesuai. Pelarut akan berdifusi menembus dinding sel, kemudian memasuki ruang sel yang memiliki zat aktif. Perbedaan konsentrasi antara bagian dalam dan luar sel menyebabkan larutan zat aktif yang lebih pekat terdorong keluar ke pelarut. Proses difusi ini berlangsung secara berulang hingga tercapai kondisi kesetimbangan konsentrasi antara larutan di dalam sel dan di luar sel (Mumarli dkk., 2024).

2. Ekstraksi Panas

Ekstraksi panas adalah metode penarikan senyawa aktif yang dilakukan dengan pemberian panas selama proses berlangsung, dengan tujuan mempercepat laju ekstraksi. Salah satu teknik yang termasuk dalam metode ini adalah *refluks*. Pada metode refluks, pelarut yang sesuai atau volatil dipanaskan hingga menguap pada suhu tinggi. Uap yang terbentuk kemudian didinginkan menggunakan kondensor sehingga mengembun kembali dan mengalir ke dalam labu reaksi. Mekanisme ini memungkinkan pelarut tetap berada dalam sistem selama proses berlangsung, sehingga kontak antara pelarut dan sampel terjadi secara kontinu, meningkatkan efisiensi ekstraksi (Mumarli dkk., 2024).

C. Skrining Fitokimia

Salah satu pendekatan yang umum digunakan untuk mengetahui jenis senyawa yang terdapat pada suatu tanaman adalah melalui skrining fitokimia. Proses ini merupakan tahapan awal dalam analisis yang berfungsi memberikan informasi awal terkait keberadaan senyawa tertentu pada bahan alam yang akan diteliti. Melalui skrining fitokimia, keberadaan kelompok senyawa dalam tanaman dapat diidentifikasi secara visual berdasarkan perubahan warna yang muncul selama pengujian (Ningsih dkk., 2020).

Skrining fitokimia merupakan metode analisis kualitatif yang bertujuan untuk mendeteksi keberadaan senyawa metabolit sekunder pada tanaman, seperti alkaloid, flavonoid, saponin, tanin, steroid, dan terpenoid (Suryani dkk., 2023). Setiap senyawa metabolit sekunder yang terkandung dalam tumbuhan umumnya memiliki aktivitas biologis tertentu, sehingga perlu dilakukan proses identifikasi

yang lebih mendalam. Salah satu teknik yang dapat digunakan untuk mengenali jenis metabolit sekunder tersebut adalah skrining fitokimia. Prosedur ini dilakukan dengan mengamati perubahan warna yang terjadi akibat reaksi antara sampel dan pereaksi spesifik yang digunakan (Akasia dkk., 2021).

D. Jerawat

Jerawat adalah salah satu masalah kulit yang kerap menjadi keluhan, terutama pada usia remaja, karena sering kali menurunkan rasa percaya diri. Kondisi ini biasanya muncul di area tertentu seperti wajah, leher, dada, maupun punggung. Munculnya jerawat dapat dipengaruhi oleh banyak faktor, misalnya riwayat genetik, perbedaan ras, perubahan musim, kondisi psikologis, fluktuasi hormon, atau infeksi bakteri. Secara medis, jerawat terbentuk ketika kelenjar pilosebasea tersumbat, sehingga memicu peradangan akibat hambatan pada saluran di lapisan epidermis kulit (Sugiarti dkk., 2020).

Jerawat muncul akibat terjadinya penyumbatan pada kelenjar minyak kulit yang disertai peradangan. Kondisi ini membuat aliran minyak terhambat, sehingga area tersebut membengkak dan mengering hingga membentuk isi jerawat (Silvyana dkk., 2024). Jerawat merupakan suatu kondisi peradangan yang bersifat kronis pada folikel pilosebasea, yang dapat memicu munculnya dua tipe lesi, yaitu lesi non-inflamasi seperti komedo yang terbuka maupun tertutup, serta lesi inflamasi yang meliputi papula, pustula, dan nodul. Kulit manusia tersusun atas tiga lapisan utama, yakni epidermis, dermis, dan hipodermis. Dalam struktur kulit tersebut, unit pilosebasea berfungsi sebagai lokasi utama produksi hormon (Zulfa & Febrina, 2023).

Proses patofisiologi jerawat melibatkan empat mekanisme utama, yakni hiperkeratinisasi pada folikel, pertumbuhan bakteri secara berlebihan, peningkatan produksi sebum, serta terjadinya peradangan. Pada wanita, faktor hormonal dan gangguan regulasi sistem imun diduga berperan dalam mempertahankan jerawat hingga usia dewasa. Hormon androgen memiliki kontribusi penting terhadap munculnya jerawat persisten pada wanita dewasa, terutama melalui peningkatan produksi sebum di folikel sebasea. Sebuah penelitian melaporkan bahwa 54,56% dari 835 responden wanita penderita jerawat menunjukkan kadar androgen yang lebih tinggi dari normal. Pengaruh androgen dalam mekanisme terjadinya jerawat dimediasi oleh reseptor androgen berafinitas tinggi di dalam sel, yang terletak pada lapisan basal dan suprabasal epidermis, serta pada kelenjar sebasea (Zulfa & Febrina, 2023).

Jerawat muncul akibat hipersensitivitas kelenjar sebasea terhadap kadar androgen yang sebenarnya berada pada tingkat normal dalam sirkulasi tubuh. Kondisi ini juga dapat dipicu oleh berbagai faktor, antara lain perubahan pola keratinisasi, peningkatan produksi sebum, pembentukan fraksi asam lemak bebas, pertumbuhan bakteri yang berlebihan, peningkatan hormon androgen, serta faktor psikologis. Secara umum, penyebab jerawat dibagi menjadi faktor internal dan eksternal. Faktor internal mencakup aspek fisik maupun psikologis. Dari sisi fisiologis, jerawat dapat timbul karena perubahan mekanisme produksi keratin dalam folikel, peningkatan sekresi sebum beserta komponen asam lemaknya, serta bertambahnya jumlah flora folikel. Sementara itu, faktor psikologis seperti stres juga berperan memicu timbulnya jerawat. Adapun faktor eksternal meliputi usia,

pola makan, kondisi cuaca, tingkat aktivitas, lingkungan sekitar, hingga penggunaan kosmetik dan kebiasaan merawat kulit wajah. Dengan banyaknya faktor penyebab, penanganan jerawat sering kali difokuskan pada perawatan wajah yang tepat (Sifatullah & Zulkarnain, 2021).

E. Reseptor Androgen

Androgen merupakan faktor endogen utama yang berperan dalam proses terjadinya jerawat. Penggunaan agen antiandrogen dapat menekan atau menghambat pembentukan prekursor androgen, serta mengintervensi kerja enzim metabolisme androgen dan reseptor androgen pada jaringan kulit. Melalui mekanisme tersebut, terapi antiandrogen efektif dalam menurunkan produksi sebum sekaligus mengurangi munculnya jerawat (Pinartin dkk., 2023).

Dalam mekanisme patogenesis jerawat, hormon androgen memiliki peran yang signifikan terhadap munculnya kelainan kulit ini. Androgen menstimulasi pembentukan lipid dan memicu diferensiasi sel sebosit, yang pada akhirnya menciptakan kondisi ideal bagi kolonisasi bakteri *Propionibacterium acnes*. Kehadiran bakteri tersebut memicu reaksi peradangan di area terkait, sehingga memunculkan lesi jerawat (Shodiq dkk., 2022). Androgen berperan penting dalam perkembangan serta pengaturan aktivitas kelenjar sebasea, termasuk proses sekresi sebum pada pria maupun wanita. Kadar hormon androgen pada pria umumnya lebih tinggi, sehingga merangsang aktivitas kelenjar sebasea yang lebih intens dan menyebabkan produksi sebum pada pria lebih banyak (Silviaa dkk., 2020) Pada masa pubertas, kadar hormon ini mengalami peningkatan, yang selanjutnya menstimulasi kelenjar sebasea, memicu produksi sebum, serta mendorong

proliferasi keratinosit di folikel (Wijaya dkk., 2023). Salah satu hormon androgen yang terlibat dalam timbulnya jerawat adalah *Adenocorticotropin Hormone* (ACTH), yang peningkatannya dapat dipicu oleh *Corticotropin Releasing Hormone* (CRH) (Fadilah, 2021). Faktor psikologis, seperti stres, juga memengaruhi munculnya jerawat (Sifatullah & Zulkarnain, 2021). Ketika otak menerima sinyal stres, hipotalamus mengeluarkan CRH ke dalam sistem portal hipofisis, sehingga merangsang hipofisis anterior untuk melepaskan ACTH ke sirkulasi sistemik. Proses ini memicu korteks adrenal menghasilkan glukokortikoid dan epinefrin. Mekanisme ini dikenal sebagai sumbu hipotalamus-hipofisis-adrenal (*hypothalamic-pituitary-adrenal axis* atau HPA axis) (Fadilah, 2021).

Kadar glukokortikoid yang meningkat dalam waktu lama dapat memberikan pengaruh langsung terhadap kelenjar sebasea serta sel keratinosit yang berada pada saluran seboglandularis dan bagian akroinfundibulum. Akibatnya, produksi sebum meningkat dan keratinosit mengalami proliferasi, yang pada akhirnya memicu terbentuknya jerawat. Kelebihan sebum ini juga memperbanyak komponen komedogenik dan inflamatorik yang menjadi penyebab utama peradangan pada jerawat. Pada penderita jerawat, kadar androgen di dalam darah cenderung lebih tinggi, kemudian diubah menjadi metabolit aktif, yaitu 5-alfa dihidrotestosteron. Hormon ini akan berikatan dengan reseptor androgen di sitoplasma, sehingga memicu proliferasi sel-sel penghasil sebum. Kulit yang rentan berjerawat umumnya memiliki aktivitas enzim 5-alfa reduktase yang lebih tinggi, disertai kepadatan reseptor androgen yang lebih banyak. Inilah sebabnya jerawat sering kali hanya

muncul pada area kulit yang memiliki konsentrasi kelenjar sebasea lebih tinggi (Fadilah, 2021).

F. Metode Pengujian *In Silico*

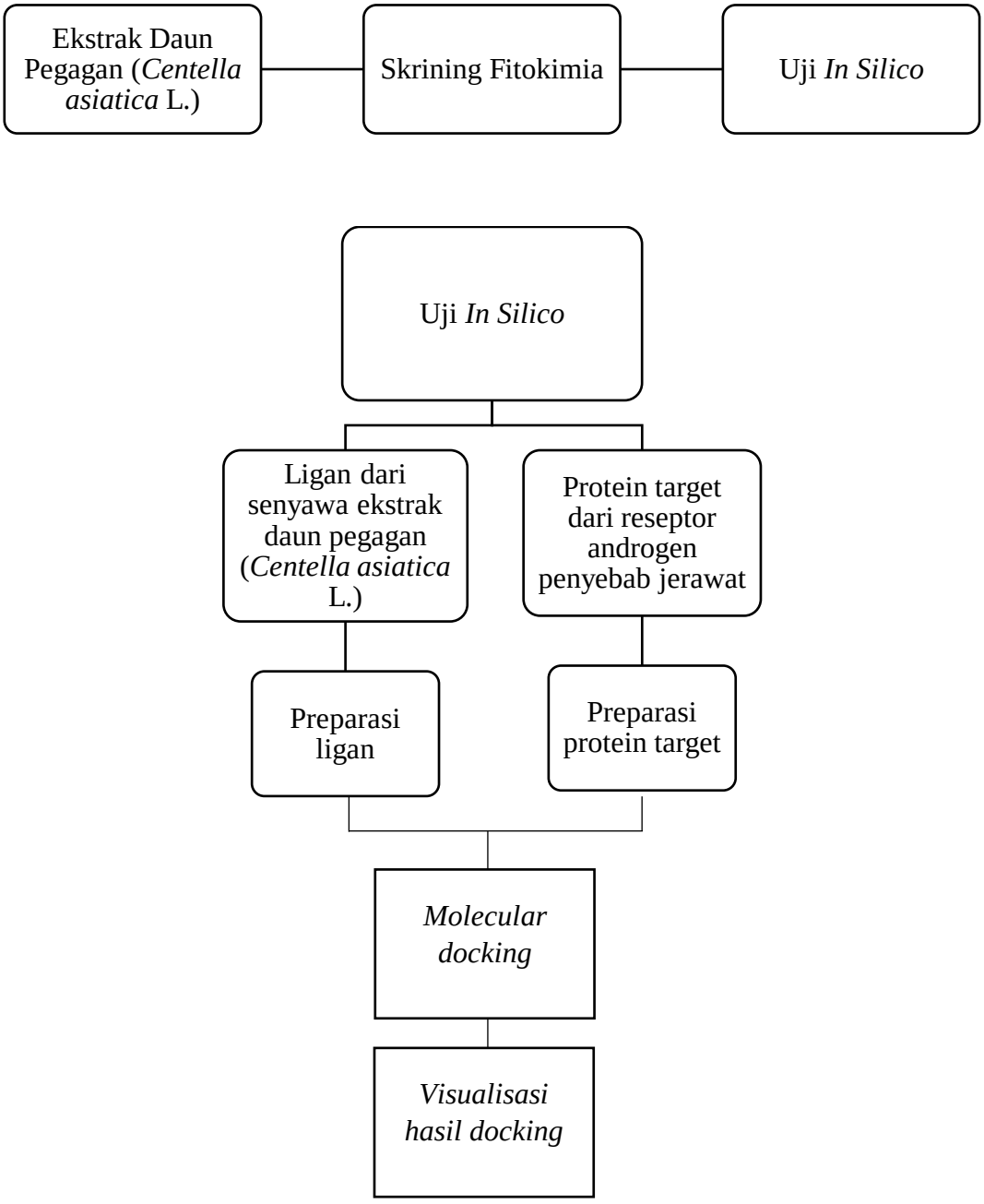
Studi *in silico* merupakan metode pengujian yang dilakukan dengan bantuan komputer dan perangkat lunak. Pendekatan ini dikembangkan sebagai alternatif untuk membatasi, mengurangi, atau bahkan menggantikan penggunaan hewan uji, sehingga tetap dapat memberikan informasi terkait keamanan dan efektivitas suatu obat. Salah satu bentuk penerapan studi *in silico* adalah melalui CADD (*Computer-Aided Drug Design*), yaitu teknologi yang memanfaatkan komputer untuk memprediksi aktivitas serta sifat molekul obat sebelum pengujian lanjutan dilakukan di laboratorium (Siagian dkk., 2022).

Salah satu teknik *in silico* yang banyak dimanfaatkan adalah *molecular docking*. Metode komputasi ini digunakan untuk memprediksi bagaimana dua molekul dapat berinteraksi hingga membentuk model ikatan yang stabil. Dalam berbagai penelitian penemuan obat, proses *docking* umumnya dilakukan antara molekul berukuran kecil dengan makromolekul, seperti pada interaksi antara protein dan ligan (Makatita dkk., 2020). Tujuan utama *molecular docking* adalah memprediksi bagaimana dua molekul berinteraksi serta menilai tingkat afinitas di antara keduanya. Nilai afinitas hasil interaksi tersebut dinyatakan dalam bentuk skor, yang merepresentasikan besarnya energi total dari ikatan yang terbentuk antara protein dan ligan (Siagian dkk., 2022). Energi ikatan merepresentasikan besarnya energi yang diperlukan untuk membentuk interaksi antara ligan dengan protein atau reseptor. Nilai energi ikatan yang lebih rendah menunjukkan bahwa

ikatan tersebut lebih stabil. Semakin stabil hubungan antara ligan dan reseptor, maka dapat diperkirakan bahwa aktivitas biologis yang dihasilkan juga akan semakin tinggi (Pramudiyawati dkk., 2024).

Salah satu software perangkat lunak yang digunakan yaitu *Discovery Studio, Protein Data Bank* (PDB), PubChem dan PyMOL (Rumayomi dkk., 2024). Software *Discovery Studio Visualizer* adalah software yang digunakan pada saat tahap akhir dari *molecular docking* yaitu pada tahapan visualisasi, baik secara dua dimensi ataupun tiga dimensi (Alfaridza dkk., 2025). PDB atau *Protein Data Bank* adalah database molekul biologis besar, seperti protein. PDB dapat diakses dari https://www.rcsb.org/ dalam berbagai format dan dapat digunakan oleh peneliti lain untuk memobilisasi biaya dan upaya penelitian (Ahmad dkk., 2025). PubChem merupakan database molekul kimia untuk suatu pengujian yang dapat diakses pada https://www/pubchem.ncbi.nlm.nih.gov dalam berbagai format, salah satunya ialah format sdf (Alfaridza dkk., 2025). Serta menggunakan AutoDock Vina dan visualisasi hasil *molecular docking* mengunakan PyMOL dan Discovery Studio Visualizer (Normi dkk., 2024).

G. Kerangka Konsep



H. Hipotesis

1. Ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki beberapa kandungan fitokimia
2. Ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki potensi inhibitor reseptor androgen pada jerawat setelah diuji secara *in silico*

BAB III

METODE KERJA

A. Jenis Penelitian

Jenis penelitian yang dilakukan adalah penelitian eksperimental di laboratorium untuk melakukan skrining fitokimia dari ekstrak etanol daun pegagan (*Centella asiatica* L.) yang berpotensi sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat yang dilakukan dengan pengujian secara *in silico*.

B. Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Biologi dan Laboratorium Kimia Universitas Megarezky Makassar dengan waktu penelitian bulan Mei-Juli 2025.

C. Populasi dan Sampel

1. Populasi

Populasi yang digunakan pada penelitian ini adalah daun pegagan (*Centella asiatica* L.).

2. Sampel

Sampel yang digunakan pada penelitian ini adalah beberapa kandungan senyawa metabolit sekunder yang terdapat pada daun pegagan (*Centella asiatica* L.).

D. Alat dan Bahan Penelitian

1. Alat-alat yang Digunakan

Alat-alat yang digunakan pada skrining fitokimia adalah batang pengaduk, cawan, erlenmeyer, gelas kimia, gelas ukur, label, lumpang, oven, pinset, pipet tetes, peralatan maserasi, plat tetes, *rotary evaporator*, spatula, tabung reaksi dan timbangan analitik. Sedangkan alat-alat yang digunakan pada pengujian *in silico* adalah laptop Dell dengan spesifikasi intel Core i5 dengan perangkat lunak *software AutoDock Tools* 1.5.7, *AutoDock Vina*, *Discovery Studio* 2025 *Client*, pkCSM, *Protein Data Bank* (PDB), *PubChem*, *PyMol*, dan *SwissADME*.

2. Bahan-bahan yang Digunakan

Bahan yang digunakan pada skrining fitokimia adalah aquadest, asam klorida (HCl), asam sulfat (H_2SO_4), besi (III) klorida ($FeCl_3$), daun pegagan (*Centella asiatica* L.), etanol 96%, natrium hidroksida (NaOH), pereaksi Dragendroff, pereaksi Wagner, serbuk Magnesium dan tissue. Sedangkan bahan-bahan yang digunakan pada pengujian *in silico* adalah senyawa *indole* dan *imidazole* dari golongan alkaloid, senyawa *catechin* dan *naringenin* dari golongan fenolik, senyawa *kaempferol* dan *quercetin* dari golongan flavonoid, senyawa *centellin* dari golongan saponin, dan senyawa *asiatic acid* dari golongan triterpenoid, serta protein reseptor androgen dengan kode 2PIV.

E. Prosedur Kerja

1. Penyiapan Alat

Alat yang akan digunakan dibersihkan menggunakan sabun dan dibilas menggunakan aquadest secara berulang.

2. Penyiapan Simplisia

Proses penyiapan bahan diawali dengan pengumpulan daun pegagan (*Centella asiatica* L.) yang diperoleh dari wilayah Kabupaten Takalar. Daun yang telah terkumpul dibersihkan dari kotoran menggunakan air mengalir hingga benar-benar bersih, kemudian ditiriskan. Setelah itu, dilakukan pengeringan di bawah paparan sinar matahari selama 3–4 hari dengan permukaannya ditutup kain hitam, hingga diperoleh simplisia kering.

3. Pembuatan Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Proses ekstraksi dilakukan dengan metode maserasi. Pertama dilakukan perajangan pada daun pegagan (*Centella asiatica* L.). Hasil perajangan tersebut kemudian direndam dalam pelarut etanol 96%. Proses maserasi dilakukan selama 3 hari yang bertujuan untuk menarik zat aktif dari daun pegagan (*Centella asiatica* L.). Dalam proses maserasi, pengadukan dilakukan secara berkala untuk memastikan penyarian berjalan dengan optimal. Setelah masa rendaman selama tiga hari selesai, larutan tersebut kemudian disaring guna memisahkan antara cairan filtrat dan ampas yang terbentuk. Filtrat yang telah dipisahkan selanjutnya akan diuapkan menggunakan rotary evaporator hingga menghasilkan ekstrak dengan konsistensi kental.

4. Skrining Fitokimia Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Beberapa metode pengujian skrining fitokimia:

1) Uji Alkaloid

Proses identifikasi alkaloid dilakukan dengan menimbang ekstrak sebanyak 0,5 g, kemudian menambahkan 10 ml larutan HCl. Campuran tersebut dipanaskan selama 30 menit, lalu didinginkan dan disaring hingga diperoleh filtrat. Filtrat yang dihasilkan dibagi ke dalam dua tabung reaksi. Pada tabung pertama, ditambahkan dua tetes pereaksi Dragendorff dan diamati hasilnya; munculnya endapan berwarna jingga menunjukkan adanya kandungan alkaloid pada sampel. Sementara itu, pada tabung kedua ditambahkan dua tetes pereaksi Wagner, dan jika terbentuk endapan berwarna merah kecokelatan, maka sampel dinyatakan positif mengandung alkaloid (Oktapiya dkk., 2022).

2) Uji Flavonoid

Sebanyak 2 ml sampel dipanaskan selama kurang lebih lima menit. Setelah itu, ditambahkan 0,1 gram logam magnesium (Mg) dan 4–5 tetes larutan HCl pekat. Munculnya warna jingga pada campuran tersebut menjadi indikator adanya kandungan flavonoid (Hamidah dkk., 2022).

3) Uji Fenolik

Sebanyak 1 mL larutan ekstrak diambil dan dimasukkan ke dalam tabung reaksi. Selanjutnya, ditambahkan dua tetes larutan $FeCl_3$ 5%. Adanya senyawa fenolik pada sampel ditandai dengan munculnya warna hijau atau biru yang intens (Manongko dkk., 2020).

4) Uji Saponin

Sebanyak 0,5 g sampel uji ditimbang dan dimasukkan ke dalam tabung reaksi, kemudian ditambahkan 10 mL air panas. Setelah campuran didinginkan, tabung dikocok dengan kuat selama sekitar 10 detik. Munculnya busa yang tidak hilang meskipun telah ditambahkan larutan HCl 2N menjadi indikator adanya kandungan saponin (Djoko dkk., 2020).

5) Uji Triterpenoid

Uji keberadaan triterpenoid dilakukan dengan menambahkan larutan HCl pekat serta H_2SO_4 pekat ke dalam 2 mL sampel. Munculnya cincin berwarna merah kecokelatan atau ungu menandakan positif adanya senyawa triterpenoid (Hamidah dkk., 2022).

F. Pengujian *In Silico*

1. Menyiapkan struktur senyawa aktif atau ligan dari daun pegagan (*Centella asiatica* L.) yang diunduh melalui *website* https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov, lalu dipreparasi dan dioptimasi menggunakan *AutoDock Tools*
2. Dilakukan pengujian fisikokimia menggunakan *website* https://swissadme.ch dan pengujian ADMET menggunakan *website* https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsm/
3. Menyiapkan struktur protein target dari reseptor androgen penyebab jerawat yang diperoleh pada *website* https://www.rcsb.org, lalu dipreparasi dan dioptimasi menggunakan *AutoDock Tools*
4. Dilakukan *molecular docking* pada hasil preparasi dari senyawa aktif dan protein target menggunakan *Autodock Vina*

5. Dilakukan visualisasi hasil molecular docking menggunakan *PyMol* dan *Discovery Studio Visualizer*

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

A. Hasil

1. Skrining Fitokimia

1.1 Hasil Rendemen

Tabel 4.1 Hasil Rendemen Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Nama Simplisia	Berat Simplisia (gram)	Berat Ekstrak (gram)	Rendemen (%)
Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)	89,8	18,6	20,71

(Sumber: Data Primer, 2025)

1.2 Skrining Fitokimia Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Tabel 4.2 Hasil Skrining Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)

Senyawa	Pereaksi	Hasil Pengamatan	Literatur	Keterangan
Alkaloid	Pereaksi Dragendorff	Berwarna jingga	Endapan berwarna jingga	+
	Pereaksi Wagner	Endapan berwarna kecoklatan	Endapan berwarna merah kecoklatan	+
Flavonoid	Logam Magnesium + HCl Pekat	Berwarna jingga	Warna jingga	+
Fenolik	FeCl3 5%	Warna hijau	Warna hijau atau biru	+
Saponin	Aquadest + HCl	Busa stabil	Busa stabil	+
Triterpenoid	HCl pekat + H2SO4 pekat	Cincin merah kecoklatan	Cincin merah kecoklatan atau violet	+

(Sumber: Data Primer, 2025)

Keterangan :

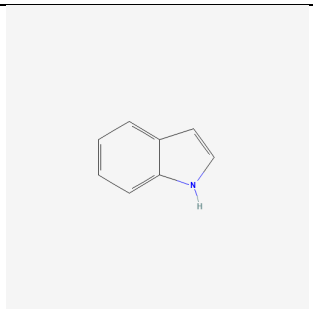
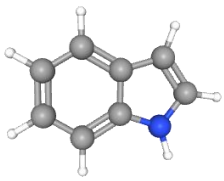
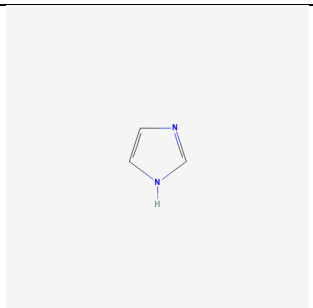
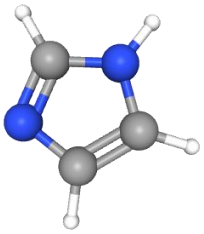
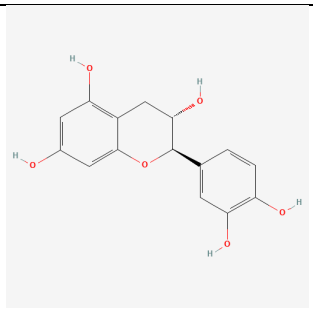
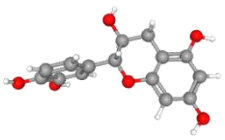
(+) : Terkandung senyawa metabolit sekunder

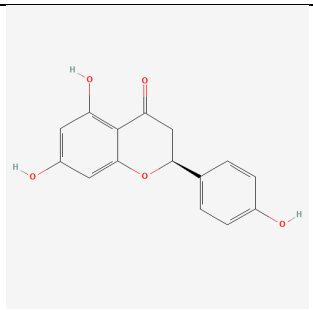
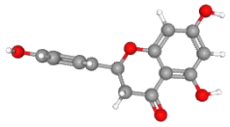
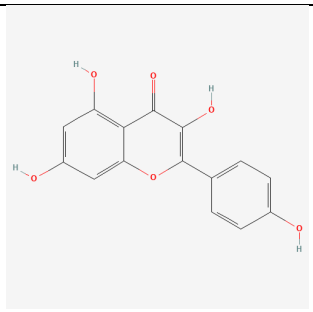
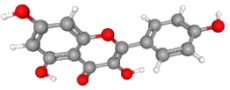
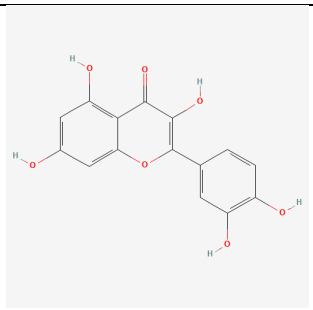
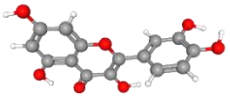
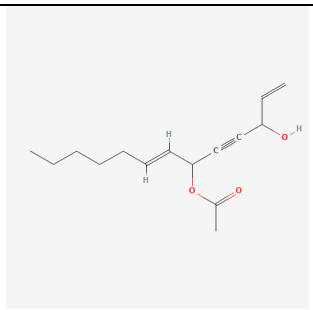
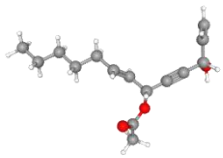
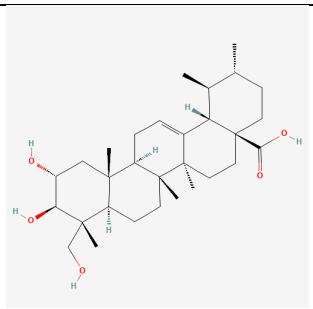
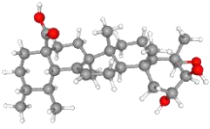
(-) : Tidak terkandung senyawa metabolit sekunder

2. *In Silico*

2.1 Preparasi Sampel

Tabel 4.3 Struktur Senyawa Ligan Uji

Senyawa	Struktur 2D Senyawa	Struktur 3D Senyawa
Indole		
Imidazole		
Catechin		

Naringenin		
Kaempferol		
Quercetin		
Centellin		
Asiactic Acid		

Tabel 4.4 Uji Fisikokimia Ligan Uji

Senyawa	**Molecular Weight (≤500)**	**MLOGP (≤4.15)**	**Num. H-bond Acceptors (≤10)**	**Num. H-Bond Donors (≤5)**
Indole	117.15	1.57	0	1
Imidazole	68.08	-0.92	1	1
Catechin	290.27	0.24	6	5
Naringenin	272.25	0.71	5	3
Kaempferol	286.24	-0.03	6	4
Quercetin	302.24	-0.56	7	5
Centellin	250.33	2.77	3	1
Asiatc acid	488.70	4.14	5	4

Tabel 4.5 Uji ADMET Ligan Uji

Senyawa	**Absorpsi (Human Intestina Absorption)**	**Distribution (Volume Distribution)**	**Metabolisme (CYP3A4 Inhibitor)**	**Eksresi (Total Clearance)**	**Toksisitas (AMES Toxicity)**
Indole	93.3	0.26	No	0.396	No
Imidazole	91.782	-0.335	No	0.809	No
Catechin	68.829	1.027	No	0.183	Yes
Naringenin	91.31	-0.015	No	0.06	No
Kaempferol	74.29	1.274	No	0.477	No
Quercetin	77.207	1.559	No	0.407	No
Centellin	94.924	-0.056	No	1.92	No

Asiatc acid	62.855	-1.6	No	0.202	No

2.2 Preparasi Reseptor

Tabel 4.6 Protein Target Inhibitor Reseptor Androgen pada Jerawat

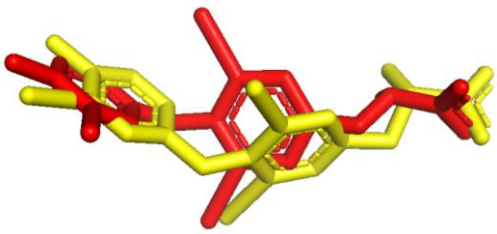
Pathway	**Kode Protein**	**Struktur 3D Protein**
Androgen Receptor	2PIV	

2.3 Validasi Metode *Docking*

Tabel 4.7 Penentuan *Grid Box* dan Nilai RMSD *Docking*

Kode Protein	***Grid Box***			**Nilai RMSD Protein Target (Å)**
	x	**y**	**z**	
2PIV	19.264	15.558	29.799	1.688

Tabel 4.8 Hasil *Overclay Co-Crystal* Ligan dan *Redock* Ligan

Kode Protein	**Superimposisi Ligan**
2PIV	

(Sumber: Data Primer, 2025)

2.4 Hasil *Docking* Ligan Uji

Tabel 4.9 Hasil *Docking* Ligan Uji

Senyawa	Nilai Ikatan Energi Bebas (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Jarak	Ikatan Hidrofobik	Ikatan Elektrostatik
Native ligand	-5.5	ILE672, PHE673, GLU829, ARG840	2.56055 2.03277 3.33514 2.19261	PRO671, PRO723, GLY724, ASN727, ASN833, TYR834, GLU837	
Indole	-4.6	ASN833, GLU837	2.64458 2.39644	PHE673, PRO723, LEU830, TYR834, LYS836	
Imidazole	-2.7	VAL730, GLN733	3.58375 2.52079	VAL716, LYS720, PHE725, MET734, ILE737	
Catechin	**-5.9**	ARG840	2.29609	PRO671, ILE672, PHE673, LEU674, PRO723, LYS724, LEU830, ASN833, TYR834, GLU837	
Naringenin	**-5.7**			PRO671, ILE672, PHE673, PRO723, GLY724, LEU830, ASN833, TYR834, GLU873, ARG840	

Kaempferol	-5.2			PRO671, ILE672, PHE673, PRO723, GLY724, LEU830, ASN833, TYR834	GLU837, ARG840
Quercetin	**-8.4**	GLY724	2.50208	VAL676, ALA679, ILE680, LYS720, ALA721, LEU722, PRO723, PHE725, ARG726, ASN727	
Centellin	**-6.1**	ILE672, PHE673, GLU837, ARG840	2.42006 2.09202 2.1591 2.39165	PRO671, VAL676, PRO723, ASN833 TYR834	
Asiatic acid	**-6.3**	GLU829	3.29362	PRO671, ILE672, PHE673, PRO723, GLY724, ASN727, LEU830, ASN833, GLU837, ARG840	

(Sumber: Data Primer, 2025)

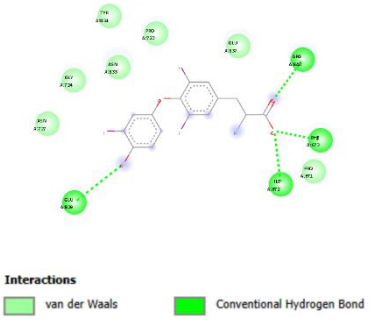
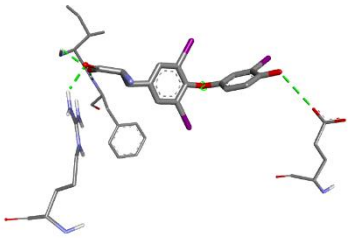
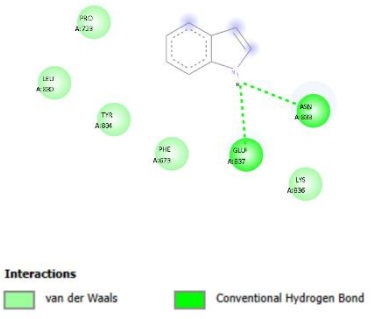
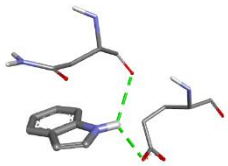
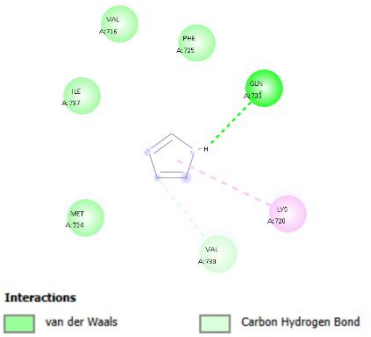
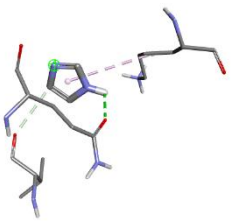
Keterangan:

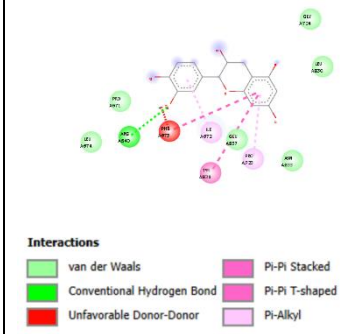
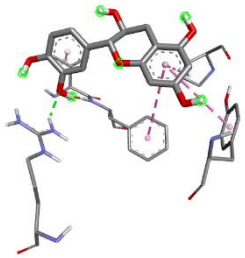
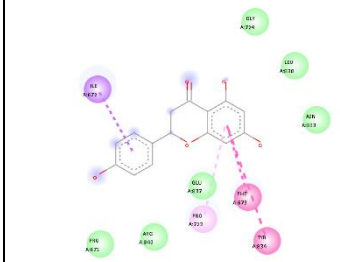
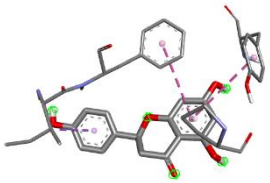
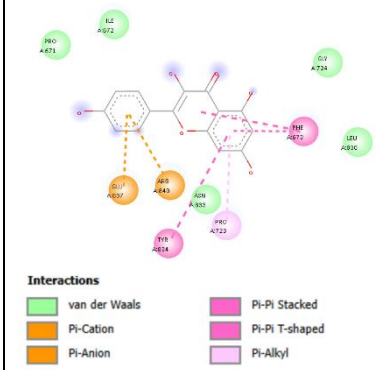
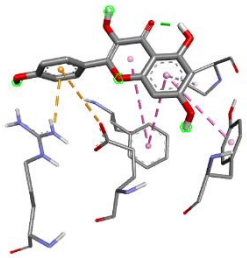
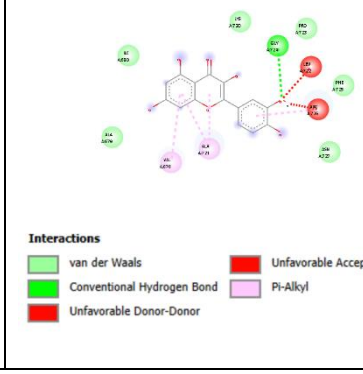
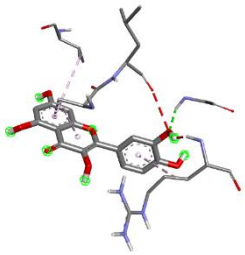
- Cetak tebal merupakan senyawa yang memiliki energi ikatan lebih rendah dari *native ligand*
- Warna kuning merupakan sisi aktif asam amino protein target atau reseptor androgen dengan kode 2PIV, yaitu: ILE672,

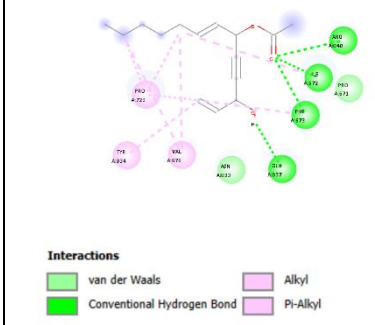
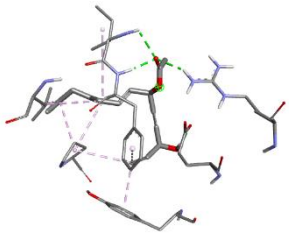
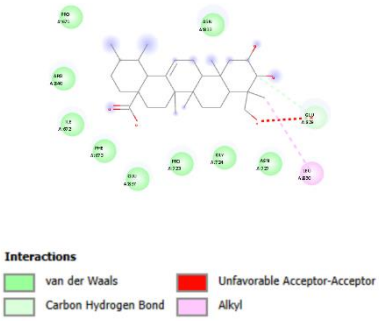
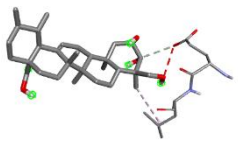
PHE673, GLY724, ARG726, ASN727, PHE826, GLU829, ASN833, TYR834, GLU837, ARG840

2.5 Visualisasi Hasil *Molecular Docking*

Tabel 4.10 Visualisasi Hasil *Docking*

Senyawa	Visualisasi 2D	Visualisasi 3D
Native ligand		
Indole		
Imidazole		

Catechin		
Naringenin		
Kaempferol		
Quercetin		

Centellin		
Asiatic acid		

(Sumber: Data Primer, 2025)

B. Pembahasan

Pada penelitian ini dilakukan 5 pengujian skrining fitokimia yaitu senyawa alkaloid, fenolik, flavonoid, saponin, dan triterpenoid. Pada pengujian alkaloid, pereaksi yang digunakan ialah pereaksi dragendroff dengan indikator terdapat endapan berwarna jingga jika sampel memiliki kandungan alkaloid serta menggunakan pereaksi wagner sebanyak dengan indikator terdapat endapan yang berwarna merah kecoklatan jika sampel memiliki kandungan alkaloid (Oktapiya dkk., 2022), berdasarkan penelitian yang dilakukan Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) positif memiliki kandungan senyawa alkaloid, sesuai dengan penelitian (Sadik & Anwar, 2022) bahwa Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki senyawa alkaloid.

Pada pengujian fenolik, pereaksi yang digunakan ialah larutan FeCl3 5% dengan indikator sampel mengandung fenolik jika terbentuk warna hijau atau biru yang kuat (Manongko dkk., 2020), berdasarkan penelitian yang dilakukan Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) positif memiliki kandungan senyawa fenolik, sesuai dengan penelitian (Djoko dkk., 2020) bahwa Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki senyawa fenolik.

Pada pengujian flavonoid, pereaksi yang digunakan ialah logam Magnesium dan HCl pekat dengan indikator terbentuk warna jingga jika memiliki kandungan flavonoid (Hamidah dkk., 2022), berdasarkan penelitian yang dilakukan Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki kandungan senyawa flavonoid, sesuai dengan penelitian (Hamidah dkk., 2022) bahwa Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki senyawa flavonoid.

Pada pengujian saponin, pereaksi yang digunakan ialah aquadest dan HCl pekat disertai dengan pengocokan yang kuat dengan indikator sampel mengandung fenolik jika terbentuk busa yang terbentuk stabil (Djoko dkk., 2020), berdasarkan penelitian yang dilakukan Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) positif memiliki kandungan senyawa saponin, sesuai dengan penelitian (Djoko dkk., 2020) bahwa Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki senyawa saponin.

Pada pengujian triterpenoid, pereaksi yang digunakan ialah HCl pekat dan H2SO4 pekat dengan indikator adanya cincin merah kecoklatan atau violet jika memiliki kandungan triterpenoid (Hamidah dkk., 2022), berdasarkan penelitian yang dilakukan Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki kandungan senyawa

triterpenoid, sesuai dengan penelitian (Hamidah dkk., 2022) bahwa Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki senyawa triterpenoid.

Selanjutnya setelah dilakukan skrining fitokimia dan diketahui bahwa kandungan fitokimia yang ada pada Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) adalah alkaloid, fenolik, flavonoid, saponin dan triterpenoid, maka dilakukan pengujian *in silico* dengan tujuan mengetahui potensi Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat.

Dilakukan studi literature untuk mengetahui senyawa apa saja yang ada disetiap kandungan fitokimia yang ada pada Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.), yang pertama yaitu senyawa alkaloid dimana menurut (Susetyarini & Nurrohman, 2022) bahwa alkaloid yang terkandung dalam daun pegagan berasal dari golongan *piridine, tropen, kinolin, isokinolin, indole, imidazole, purine, amin,* dan *steroid*. Kemudian senyawa fenolik menurut (Nilasari dkk., 2023) yaitu *catechin, luteolin, rutin, mirisetin, naringin,* dan *naringenin.* Selanjutnya untuk senyawa flavonoid menurut (Susetyarini & Nurrohman, 2022) ialah senyawa yang berasal dari golongan *kaempferol, kuersetin, glikosida (3-glukosilkuersetin dan 3-glukosilkaemferol) flavonoid O-glikosida* dan *C-glikosida*. Serta berdasarkan (Silvia dkk., 2024) senyawa saponin dari Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) adalah *centellin.* Sedangkan untuk senyawa triterpenoid menurut (Rafi dkk., 2024) yaitu *asiatic acid, corosolic acid* dan *brahmic acid*.

Senyawa dari setiap golongan fitokimia yang ada diperoleh dari *webstie PubChem* kemudian dilakukan uji fisikokimia menggunakan *SwissADME* untuk dilihat apakah memenuhi syarat untuk dilakukan *molecular docking* dengan

menggunakan *Lipinski's rule of five*. Syarat *Lipinski's rule of five* terdiri dari *molecular weight* ≤ 500 Da, log P ≤ 5, H-bond donor ≤ 5, dan H-bond acceptor ≤ 10 (Shodiq dkk., 2022). Dari hasil pengecekan *Lipinski's rule of five* yang dilakukan (Tabel 4.4) didapatkan bahwa yang memenuhi kriteria *Lipinski's rule of five*, adalah *indole dan imidazole* dari golongan alkaloid, *catechin* dan *naringenin* dari golongan fenolik, *kaempferol* dan *quercetin* dari golongan flavonoid, *centellin* dari golongan saponin serta *asiatic acid* dari golongan triterpenoid. Sedangkan senyawa lainnya dari setiap golongan yang tidak disebutkan tidak memenuhi kriteria *Lipinski's rule of five*.

Kemudian senyawa yang telah memenuhi kriteria *Lipinski's rule of five,* dilakukan pengujian ADMET. Dalam bidang farmakologi dan farmakokinetik, ADMET merupakan akronim yang merujuk pada lima proses penting yang dialami obat di dalam tubuh, yaitu absorpsi (A), distribusi (D), metabolisme (M), ekskresi (E), serta toksisitas (T). Kelima aspek ini berperan menentukan bagaimana obat diserap, dialirkan ke berbagai jaringan, mengalami perubahan metabolik, dikeluarkan dari tubuh, serta potensi efek toksiknya. Keseluruhan proses tersebut akan memengaruhi kecepatan dan intensitas obat mencapai target kerjanya sehingga dapat menghasilkan efek terapeutik yang diharapkan (Nursanti, 2021).

Pada pengujian absorpsi (A), Suatu senyawa dikategorikan memiliki tingkat absorpsi yang tinggi apabila persentase penyerapannya melebihi 80%, sedangkan tingkat absorpsi yang rendah ditunjukkan bila nilainya berada di bawah 30%. Pada pemberian obat secara oral, organ utama yang berperan dalam proses penyerapan tersebut adalah usus (Krihariyani dkk., 2020). Dari (Tabel 4.5) dapat dilihat bahwa

nilai *intestinal absorption (human)* dari senyawa uji lebih dari 80% dan tidak kurang dari 30%, menunjukkan bahwa semua senyawa tersebut mempunyai absorpsi yang baik.

Pada pengujian distribusi (D), parameter yang digunakan ialah (VDss). Volume distribusi (VDss) menggambarkan besarnya volume teoritis yang dibutuhkan untuk mendistribusikan total dosis obat secara merata sehingga menghasilkan konsentrasi setara dengan yang terdapat di plasma darah. Nilai VD yang tinggi menunjukkan bahwa obat lebih banyak terdistribusi ke jaringan dibandingkan berada di plasma. Senyawa digolongkan memiliki volume distribusi rendah jika nilai Log VD kurang dari 0,15, sedangkan dikatakan tinggi apabila melebihi 0,45 (Krihariyani dkk., 2020). Dari (Tabel 4.5) dapat dilihat bahwa nilai VDss (*Steady State of Volume Distribution*) dari senyawa *catechin, kaempferol* dan *quercetin* memiliki nilai VDss yang tinggi, senyawa *indol* memiliki nilai VDss normal, sedangkan *imidazole, naringenin, centellin,* dan *asiatic acid* memiliki nilai VDss yang rendah.

Pada pengujian metabolisme (M), parameter yang digunakan ialah CYP3A4 inhibitor dimana enzim CYP3A4 berperan penting dalam mengatur proses metabolisme berbagai obat di dalam tubuh. Keberadaan enzim ini sering dimanfaatkan untuk menilai potensi suatu senyawa dalam menghambat kerja sitokrom P450. Sitokrom P450 sendiri merupakan enzim detoksifikasi yang banyak ditemukan di hati. Evaluasi terhadap kemampuan suatu senyawa dalam menginhibisi enzim ini menjadi penting, karena hambatan pada CYP3A4 dapat mengganggu kelancaran metabolisme obat di dalam tubuh (Auliya dkk., 2023).

Dari (Tabel 4.5) dapat dilihat bahwa semua senyawa uji tidak memiliki potensi menginhibisi enzim CYP3A4. Dimana yang mempunyai potensi menghambat CYP3A4 dapat mempengaruhi interaksi obat nantinya bisa menurunkan efektivitas obat.

Pada pengujian eksresi (E), perkiraan proses ekskresi suatu senyawa dapat dilakukan melalui pengukuran nilai tetapan *Total Clearance*. Parameter ini mencerminkan *hepatic clearance*, yakni laju eliminasi senyawa melalui metabolisme di hati dan sekresi empedu. Besaran ini memiliki keterkaitan erat dengan tingkat bioavailabilitas, sehingga menjadi faktor penting dalam menentukan besaran dosis yang dibutuhkan untuk mencapai konsentrasi obat pada kondisi *steady-state*. Nilai CL dapat diprediksi kecepatan ekskresi senyawa (Krihariyani dkk., 2020)**.** Dari (Tabel 4.5) bahwa senyawa yang memiliki kemampuan ekskresi paling cepat ialah *centellin*.

Serta pada pengujian toksisitas (T), penentuan potensi toksisitas suatu senyawa dapat dilakukan melalui metode *Ames Toxicity test*. Uji ini merupakan teknik yang banyak digunakan untuk mengevaluasi sifat mutagenik suatu senyawa dengan memanfaatkan bakteri sebagai sistem uji. Apabila hasil pengujian menunjukkan respons positif, hal tersebut mengindikasikan bahwa senyawa tersebut memiliki sifat mutagenik, sehingga berpotensi bertindak sebagai karsinogen, yakni zat yang dapat memicu terjadinya kanker (Krihariyani dkk., 2020). Sehingga perlu digarisbawahi bahwa senyawa yang digunakan ialah senyawa yang memiliki hasil negatif terhadap pengujian *Amex Toxicity*.

Senyawa ligan uji yang memenuhi pengujian fisikokimia dan ADMET selanjutnya dipreparasi dan dioptimasi menggunakan program *AutoDock Tool* dengan cara penambahan atom hidrogen, penggabungan senyawa menjadi non polar, penambahan muatan gasteiger dan torsi (Pitaloka dkk., 2023).

Selanjutnya dilakukan penyiapan protein target atau reseptor yang diunduh dari Protein Data Bank. Reseptor yang digunakan pada penelitian ini yaitu *Receptor Androgen* dengan kode 2PIV, protein yang digunakan ini merujuk pada penelitian sebelumnya yang dilakukan oleh (Shodiq dkk., 2022). Protein target 2PIV kemudian dioptimasi dengan cara memisahkan makromolekul protein dari molekul-molekul lain yang tidak diperlukan serta ligannya. Proses pemisahan dan optimasi, termasuk penambahan atom hidrogen serta *Compute Gasteiger*, dilakukan menggunakan *Autodock Tool* (Sari dkk., 2020).

Reseptor androgen dengan kode 2PIV ini memiliki tiga *native ligand* yaitu DHT, T3 dan SO4. Pada penelitian sebelumnya yang dilakukan oleh (Shodiq dkk., 2022), native ligand yang digunakan ialah DHT. Sedangkan pada penelitian ini *native ligand* yang digunakan adalah T3. Selanjutnya dilakukan pembuatan *grid box* menggunakan perangkat lunak *AutoDock Tools*. Adapun dalam pembuatan *grid box* harus mencakup sisi aktif protein dan *native* ligan (Alfaridza dkk., 2025), sisi aktif asam protein atau sisi aktif asam amino adalah asam amino yang berikatan langsung dengan *native ligand*. Dimana protein target yang digunakan pada penelitian ini adalah reseptor androgen dengan kode 2PIV, dengan sisi aktif asam amino yaitu ILE672, PHE673, GLY724, ARG726, ASN727, PHE826, GLU829, ASN833, TYR834, GLU837, ARG840 (Shodiq dkk., 2022). Koordinat parameter

dimension grid box yaitu x=30 y=22 z=20 dengan center x= 19.264 y=15.558 z=29.799 (Tabel 4.7).

Selanjutnya *AutoDock Vina* dibuka kemudian memasukkan perintah sehingga akan muncul output dalam format pdbqt yang merupakan file 3D ligan setelah penambatan molekuler. Kemudian output dari *AutoDock Vina* dilakukan visualisasi menggunakan *Pymol* untuk mengetahui nilai RMSD, pada penelitian ini diperoleh nilai RMSD sebesar 1.688 Å (Tabel 4.7) yang dibuktikan dengan superimposisi *native ligand* sebelum dan setelah preparasi dengan menggunakan *grid box* yang telah dibuat memperlihatkan bahwa posisi *native ligand* tidak bergeser jauh (Tabel 4.8), dimana kegiatan ini merupakan validasi metode *docking*. Validasi ini bertujuan untuk menentukan protokol *docking* yang tepat. Proses validasi dikategorikan berhasil apabila nilai RMSD yang diperoleh berada di bawah 2 Å (Prasetiyo dkk., 2024).

Hasil dari *molecular docking* adalah nilai enegi ikatan bebas dengan satuan (kkal/mol) Nilai ini mencerminkan kekuatan interaksi antara protein dan senyawa (ligan). Semakin rendah nilai afinitas ikatan yang diperoleh, maka semakin kuat pula ikatan yang terbentuk antara protein dan ligan tersebut (Putri dkk., 2024). Berdasarkan hasil uji *molecular docking* diperoleh nilai energi ikatan bebas dari yang tertinggi ke terendah yaitu (Tabel 4.9) *imidazole* (-2.7), *indole* (-4.5), *kaempferol* (-5.2), *native ligand* (-5.5), *naringenin* (-5.7), *catechin* (-5.9), *centellin* (-6.1), *asiatic acid* (-6.3), serta *quercetin* (-8.4). Berdasarkan data ini ligan uji yang mampu mengikat sisi aktif protein dengan baik adalah *naringenin, catechin, centellin, aciatic acid,* dan *quercetin* karena memiliki nilai ikatan energi bebas yang

lebih rendah dari *native ligand* (-5.5). Ligan uji diprediksi memiliki kemampuan dalam interaksi dengan reseptor target apabila memiliki nilai *binding affinity* yang sama atau lebih rendah dari *native ligand* atau pembandingnya (Naufa dkk., 2021). Hal tersebut menunjukkan bahwa senyawa yaitu *catechin, naringenin, quercetin, centellin,* dan *aciatic acid* yang berasal dari golongan fenolik, flavonoid dan triterpenoid memiliki kemampuan sebagai inhibitor reseptor androgen, dimana yang paling rendah ialah *quercetin* (-8.4), kemudian *asiatic acid* (-6.3), *centellin* (-6.1), *catechin* (-5.9), kemudian terakhir *naringenin* (-5.7),.

Tujuan dari pengamatan interaksi pada sisi aktif asam amino adalah untuk mengenali jenis-jenis ikatan yang terbentuk antara ligan dan reseptor. Interaksi tersebut meliputi ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, serta interaksi elektrostatik. Apabila ligan uji membentuk ikatan hidrogen dengan residu asam amino pada sisi aktif yang sama seperti yang terjadi pada *native ligand*, kondisi tersebut menunjukkan adanya kesamaan tipe interaksi, yang sekaligus menggambarkan kemiripan aktivitas biologisnya. Selain itu, interaksi hidrofobik dan elektrostatik berperan dalam meningkatkan stabilitas konformasi kompleks tersebut (Naufa dkk., 2021).

Berdasarkan hasil *molecular docking* diperoleh beberapa ikatan yang terbentuk antara ligan uji dan reseptor (Tabel 4.10), yaitu *native ligan* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrogen ILE672, PHE 673, GLU829, ARG840 dengan jarak berturut-turut 2.56055; 2.03277; 3.33514; 2.19261, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik GLY724, ASN727, ASN833, TYR834, GLU837, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO671 dan PRO723.

Golongan alkaloid dengan ligan uji *indole* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrogen ASN833 dan GLU837 dengan jarak 2.64458 dan 2.39644, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik PHE673 dan TYR834, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO723, LEU830, dan LYS836. Ligan uji *imidazole* tidak mampu mengikat sisi aktif asam amino, namun mengikat asam amino pada ikatan hidrogen VAL730 dan GLN733 dengan jarak 3.58375 dan 2.52079, mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik VAL716, LYS720, PHE725, MET734 dan ILE737.

Golongan fenolik dengan ligan uji *catechin* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrogen ARG840 dengan jarak 2.29609, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik ILE672, PHE673, GLY724, ASN833, TYR834 dan GLU837, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO671, LEU674, PRO723, dan LEU830. Ligan uji *naringenin* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik ILE672, PHE673, GLY724, ASN833, TYR834, GLU873, dan ARG840, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO671, PRO723, dan LEU830.

Golongan flavonoid dengan ligan uji *kaempferol* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik ILE672, PHE673, GLY724, ASN833 dan TYR834, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan elektrostatik GLU837 dan ARG840, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO671, PRO723 dan LEU830. Ligan uji *quercetin* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrogen GLY724 dengan jarak 2.50208, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik

ARG726 dan ASN727, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik VAL676, ALA679, ILE680, LYS720, ALA721, LEU722, PRO723, PHE725.

Golongan *saponin* dengan ligan uji *centellin* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrogen ILE672, PHE 673, GLU829, dan ARG840 dengan jarak berturut-turut 2.42006; 2.09202; 2.1591; dan 2.39165, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik ASN833 dan TYR834, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO671, VAL676 dan PRO723.

Golongan *triterpenoid* dengan ligan uji *asiatic acid* mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrogen GLU829 dengan jarak 3.29362, mengikat sisi aktif asam amino pada ikatan hidrofobik ILE672, PHE673, GLY724, ASN727 ASN833, GLU837 dan ARG840, serta mengikat asam amino pada ikatan hidrofobik PRO671, PRO723 dan LEU830.

Visualisasi hasil penambatan molekuler dilakukan menggunakan software *PyMol* dan *Discovery Studio Visualizer*. Reseptor hasil preparasi dan ligan hasil penambatan molekuler dibuka pada *Discovery Studio Visualizer* dengan satu lembar kerja yang sama. Hasil visualisasi akan ditampilkan dalam bentuk 2D dan 3D (Alfaridza dkk., 2025) (Tabel 4.10).

BAB V

PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan peneliti dapat menyimpulkan bahwa:

1. Ekstrak etanol Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memiliki beberapa kandungan senyawa metabolit sekunder yaitu alkaloid, fenolik, flavonoid, saponin dan triterpenoid
2. Uji *in silico* pada ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) memperlihatkan adanya potensi sebagai inhibitor reseptor androgen pada jerawat dengan ligan uji yaitu *quercetin* (-8.4), kemudian *asiatic acid* (-6.3), *centellin* (-6.1), *catechin* (-5.9), kemudian terakhir *naringenin* (-5.7), senyawa ini berasal dari golongan fenolik, flavonoid dan triterpenoid karena memiliki nilai afinitas yang rendah bahkan melebihi *native ligand*.

B. Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan peneliti dapat menyarankan bahwa:

1. Untuk penelitian selanjutnya disarankan untuk dilakukan penelitian eksperimental lebih lanjut terkait senyawa metabolit sekunder ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) yang diperoleh pada skrining fitokimia
2. Serta disarankan untuk dilakukan pengujian *in silico* dengan menggunakan *tools* lain, agar tidak hanya *tools* pada penelitian ini saja yang dipahami

DAFTAR PUSTAKA

Ahmad, S., Bano, N., & Raza, K. (2025). REVIEW RCSB Protein Data Bank : *revolutionising drug discovery and design for over five decades*. *Medical Data Mining*, *8*(2), 1–12.

Akasia, A. I., Nurweda Putra, I. D. N., & Giri Putra, I. N. (2021). Skrining Fitokimia Ekstrak Daun Mangrove *Rhizophora mucronata* dan *Rhizophora apiculata* yang Dikoleksi dari Kawasan Mangrove Desa Tuban, Bali. *Journal of Marine Research and Technology*, *4*(1), 16. https://doi.org/10.24843/jmrt.2021.v04.i01.p03

Alfaridza, A. N., Astuti, R. I., & Mubarik, N. R. (2025). Interaksi Molekuler Senyawa Kuersetin dan Eugenol terhadap Protein Regulator Lintasan Penuaan SIR2, pada Khamir *Saccharomyces cerevisiae*. *Biota : Jurnal Ilmiah Ilmu-Ilmu Hayati*, *10*(1), 44–52. https://doi.org/10.24002/biota.v10i1.6819

Auliya, S. N., Bintari, Y. R., & Risandiansyah, R. (2023). . *Studi In Silico Aktivitas Antibakteri Senyawa Aktif Gracilaria verrucosa Dalam Menghambat Peptide Deformylase Pada Bakteri Escherichia coli dan Staphylococcus aureus Sitokrom*.

Azmalah, Z. (2023). Uji Aktivitas Antibakteri Ekstrak Daun Lengkuas Merah Terhadap Bakteri Penyebab Jerawat. *Jurnal Riset Farmasi*, 17–22. https://doi.org/10.29313/jrf.v3i1.1808

Badaring, D. R., Sari, S. P. M., Nurhabiba, S., Wulan, W., & Lembang, S. A. R. (2020). Uji Ekstrak Daun Maja (*Aegle marmelos* L.) terhadap Pertumbuhan Bakteri *Escherichia coli* dan *Staphylococcus aureus*. *Indonesian Journal of Fundamental Sciences*, *6*(1), 16. https://doi.org/10.26858/ijfs.v6i1.13941

Burhan, A. (2022). Profil Komponen Senyawa Herba Pegagan (*Centella asiatica* L.) Dari Beberapa Tempat Tumbuh di Daerah Sulawesi Selatan Dengan Analisis Sidik Jari Menggunakan FTIR. *Jurnal Ilmiah Farmasi Farmasyifa*, *5*(2), 203–211. https://doi.org/10.29313/jiff.v5i2.9716

Darma, W., & Marpaung, M. P. (2020). Analisis Jenis dan Kadar Saponin Ekstrak Akar Kuning (*Fibraurea chloroleuca* Miers) Secara Gravimetri. *Dalton : Jurnal Pendidikan Kimia dan Ilmu Kimia*, *3*(1), 51–59. https://doi.org/10.31602/dl.v3i1.3109

Djoko, W., Taurhesia, S., Djamil, R., & Simanjuntak, P. dkk. (2020). Standardisasi Ekstrak Etanol Herba Pegagan (*Centella asiatica*). *Sainstech Farma*, *13*(2), 118–123. https://ejournal.istn.ac.id/index.php/saintechfarma/article/view/765

Ernawati, H. R. (2023). *Budidaya Pegagan Tanaman Obat Berkhasiat*.

Fadilah, A. A. (2021). Hubungan Stres Psikologis Terhadap Timbulnya Akne Vulgaris. *Jurnal Ilmiah Kesehatan Sandi Husada*, *10*(2), 390–395. https://doi.org/10.35816/jiskh.v10i2.625

Febriyanto, G., Duwi, S., & Octarina, D. (2025). Uji Aktivitas Antibakteri Fraksi Etanol Daun Pegagan (*Centella asiatica* (L .) Urb) Terhadap Bakteri Penyebab Jerawat (*Propionibacterium acne*). *Jurnal Ilmiah Farmasi*, *14*(1), 59–64.

Hamidah, L. A., Rafsanjani, A., & Hariadi, P. (2022). Kombinasi Ekstrak Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) dengan Obat Anti Diabetik Oral (ADO) terhadap Penurunan Kadar Glukosa Darah Sewaktu pada Mencit. *Sinteza*, *2*(1), 40–49. https://doi.org/10.29408/sinteza.v2i1.4398

Handayani, S. N., Purwanti, A., Windasari, W., & Ardian, M. N. (2020). Uji Fitokimia dan Aktivitas Antibakteri Ekstrak Etanol Daun Kencana Ungu (*Ruellia tuberosa* L.). *Walisongo Journal of Chemistry*, *3*(2), 66. https://doi.org/10.21580/wjc.v3i2.6119

Hidayah, H., Fatmawati, F., Khairunnisa, J., & Hestina Putri, M. (2023). Aktivitas Triterpenoid Sebagai Senyawa Antikanker. *Journal Of Social Science Research*, *3*, 10168–10183.

Krihariyani, D., Sasongkowati, R., & Haryanto, E. (2020). Studi in Silico Sifat Farmakokinetik, Toksisitas, Dan Aktivitas Imunomodulator Brazilein Kayu Secang Terhadap Enzim 3-Chymotrypsin-Like Cysteine Protease Coronavirus. *Journal of Indonesian Medical Laboratory and Science (JoIMedLabS)*, *1*(1), 76–85. https://doi.org/10.53699/joimedlabs.v1i1.14

Kusuma, A. E., & Aprileili, D. A. (2022). Pengaruh Jumlah Pelarut Terhadap Rendemen Ekstrak Daun Katuk (*Sauropus androgynus* L. Merr). *SITAWA : Jurnal Farmasi Sains dan Obat Tradisional*, *1*(2), 125–135. https://doi.org/10.62018/sitawa.v1i2.22

Lestari, R. T., Zakiyah, G. L., Lailia, K. E., Puspita, H. R., Ilham, K. A. P., Kholidatul, F., Laili, W. S., Tiffany, Islamiah, K. D., Christiananta, S. D. D., & Yuni, P. (2021). Perilaku mahasiswa terkait cara mengatasi jerawat. *Jurnal Farmasi Komunitas*, *8*(1), 15–19.

Maisarah, M., Chatri, M., & Advinda, L. (2023). Karakteristik dan Fungsi Senyawa Alkaloid sebagai Antifungi pada Tumbuhan. *Jurnal Serambi Biologi*, *8*(2), 231–236.

Makatita, F. A., Wardhani, R., & Nuraini. (2020). Riset *In Silico* Dalam Pengembangan Sains di Bidang Pendidikan, Studi Kasus: Analisis Potensi Cendana Sebagai Agen Anti-Aging. *Jurnal ABDI*, *2*(1), 59–67.

Manongko, P. S., Sangi, M. S., & Momuat, L. I. (2020). Uji Senyawa Fitokimia dan Aktivitas Antioksidan Tanaman Patah Tulang (*Euphorbia tirucalli* L.). *Jurnal MIPA*, *9*(2), 64. https://doi.org/10.35799/jmuo.9.2.2020.28725

Maruzy, A., Budiarti, M., & Subositi, D. (2020). Autentikasi *Centella asiatica* (L.) Urb. (Pegagan) dan Adulterannya Berdasarkan Karakter Makroskopis, Mikroskopis, dan Profil Kimia. *Jurnal Kefarmasian Indonesia*, *February 2020*, 19–30. https://doi.org/10.22435/jki.v10i1.1830

Mumarli, M., Mulqie, L., Farmasi, P., Matematika, F., Alam, P., & Bandung, U. I. (2024). *Penapisan Fitokimia Ekstrak Etanol Daun Kirinyuh Hasil Metode Ekstraksi Refluks dan Maserasi*. 107–114.

Naufa, F., Mutiah, R., Yen, Y., & Indrawijaya, A. (2021). Studi in Silico Potensi Senyawa Katekin Teh Hijau (*Camellia sinensis*) sebagai Antivirus SARS CoV-2 terhadap Spike Glycoprotein (6LZG) dan Main Protease (5R7Y). *J.Food Pharm.Sci*, *2022*(1), 584–596. www.journal.ugm.ac.id/v3/JFPA

Nilasari, N., Rafi, M., & Mulyati, A. H. (2023). Profil Metabolit (Fenol Total Dan Spektrum FT-IR) Pegagan (*Centella asiatica*) Berdasarkan Lokasi Tumbuh Berbeda. *Helium: Journal of Science and Applied Chemistry*, *xx*(xx), 1–9. https://journal.unpak.ac.id/index.php/he_jsac

Ningsih, Hanifa, I., & Hisbiyah, A. (2020). Pengaruh Perbedaan Metode Ekstraksi Rimpang Kunyit (*Curcuma domestica*) Terhadap Rendemen dan Skrining Fitokimia. *Journal of Pharmaceutical-care Anwar Medika*, *2*(2), 49–57. https://doi.org/10.36932/jpcam.v2i2.27

Ningsih, I. S., Chatri, M., Advinda, L., & Violita. (2023). Senyawa Aktif Flavonoid yang Terdapat Pada Tumbuhan. *Jurnal Penelitian Tanaman Industri*, *8*(2), 126. https://doi.org/10.21082/jlittri.v8n2.2002.61-66

Normi, N., Supandi, S., & Komala, I. (2024). *In Silico Assessment of Chemical Constituents of Zingiber officinale Rosc. For Anti-diabetic Activity: Molecular Docking with α-Glucosidase Receptor*. *Pharmaceutical and Biomedical Sciences Journal (PBSJ)*, *5*(2), 132–142. https://doi.org/10.15408/pbsj.v5i2.36161

Nursanti, O. (2021). Validasi Penambatan Molekul untuk Mendapatkan Ligan Aktif Pada Reseptor Cyclooxygenase 2. *Prosiding Seminar Informasi Kesehatan Nasional*, 411–430.

Oktapiya, T. R., Pratama, N. P., & Purnamaningsih, N. (2022). Analisis fitokimia dan kromatografi lapis tipis ekstrak etanol daun rosella (*Hibiscus sabdariffa* L.). *Sasambo Journal of Pharmacy*, *3*(2), 105–110. https://doi.org/10.29303/sjp.v3i2.181

Pinartin, S., Suryani, L., & Ekawati, D. (2023). Analisis Faktor-Faktor Yang Berhubungan Dengan Tingkat Keparahan Kasus *Acne Vulgaris* Di Klinik Kecantikan Kasih Beauty Clinic Musi Banyuasin Tahun 2023. *Jurnal Kesehatan Tambusai*, *4*(3), 2654–2670. https://doi.org/10.31004/jkt.v4i3.16899

Pitaloka, A. D., Nurhijriah, C. Y., Kalina, K., Musyaffa, H. A., & Azzahra, A. M. (2023). Penambatan Molekuler Konstituen Kimia Tumbuhan Bawang Dayak (*Eleutherine palmifolia* (L.) Merr) terhadap Reseptor VHR sebagai Kandidat Obat Antikanker Serviks. *Indonesian Journal of Biological Pharmacy*, *3*(2), 83. https://doi.org/10.24198/ijbp.v3i2.45221

Pramudiyawati, A., Eka Putri, D., & Wilapangga, A. (2024). Skrining Studi *in Silico* Potensi Farmakokinetika dan Toksisitas Senyawa 6,10,14-trimetil-2-pentadekanon dari Ekstrak Daun Ekaliptus. *Indonesian Journal of Pharmaceutical Education*, *4*(1), 39–46. https://doi.org/10.37311/ijpe.v4i1.24493

Prasetiyo, A., Martati, T., & Saputra, P. W. (2024). *In Silico Study of Bioactive Compounds in Herba Sambiloto (Andrographis paniculata Burm. F. Nees) as HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitor*. *Jurnal Jamu Indonesia*, *9*(2), 95–105. https://doi.org/10.29244/jji.v9i2.300

Putri, T. Z. A. D., Findrayani, R. P., Isrul, M., & Lolok, N. (2024). Studi Molecular Docking Senyawa Kimia Dari Herba Putri Malu (*Mimosa pudica*) Terhadap Inhibisi Enzim A-Glukosidase Sebagai Antidiabetes Melitus. *Jurnal Pharmacia Mandala Waluya*, *3*(4), 225–233. https://doi.org/10.54883/jpmw.v3i4.104

Rafi, M., Madya, M. M., Karomah, A. H., Septaningsih, D. A., Ridwan, T., Rohaeti, E., Aisyah, S., & Idroes, R. (2024). *LC-HRMS-Based Metabolomics for Profiling the Metabolites iDifferent Plant Parts of Centella asiatica*. *HAYATI Journal of Biosciences*, *31*(6), 1106–1115. https://doi.org/10.4308/hjb.31.6.1106-1115

Ritonga, L. S., Meutia, R., & Mutia, M. S. (2024). Formulasi dan Aktivitas Gel Ekstrak Daun Terhadap Pertumbuhan Bakteri. *PREPOTIF : Jurnal Kesehatan Masyarakat*, *8*(L), 4433–4440.

Rumayomi, E., Watimmury, D. L., & Hutasoit, H. (2024). *Pemanfaatan Anggur Laut (Caulerpa racemosa) untuk Memperbaiki Sistem Imun yang berdampak pada Pencegahan Stunting dengan Pendekatan Uji In Silico dalam Bidang Neutraceutical*. *September*, 1086–1093.

Sadik, F., & Anwar, A. R. A. (2022). Standarisasi Parameter Spesifik Ekstrak Etanol Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.) Sebagai Antidiabetes. *Journal Syifa Sciences and Clinical Research*, *4*(1), 1–9. https://doi.org/10.37311/jsscr.v4i1.13310

Saptowo, A., Supriningrum, R., & Supomo, S. (2022). Uji Aktivitas Antibakteri Ekstrak Kulit Batang Sekilang (*Embeliaborneensis scheff*) Terhadap Bakteri *Propionibacterium acnes* dan *Staphylococcus epidermidis*. *Al-Ulum: Jurnal Sains Dan Teknologi*, *7*(2), 93. https://doi.org/10.31602/ajst.v7i2.6331

Sari, I. W., Junaidin, J., & Pratiwi, D. (2020). Studi Molecular Docking Senyawa Flavonoid Herba Kumis Kucing (*Orthosiphon stamineus* B.) Pada Reseptor A-Glukosidase Sebagai Antidiabetes Tipe 2. *Jurnal Farmagazine*, *7*(2), 54. https://doi.org/10.47653/farm.v7i2.194

Shodiq, M. J., Khaerunnisa, S., Setiawati, Y., Veterini, A. S., & Rehatta, N. M. (2022). Potensi Kulit Pisang Sebagai Inhibitor Reseptor Androgen Pada *Acne Vulgaris* Menggunakan Metode *in Silico*. *Jurnal Kimia*, *16*(1), 26. https://doi.org/10.24843/jchem.2022.v16.i01.p04

Siagian, J. I., Purnomo, H., & Sasmito, E. (2022). Studi *In Silico* Senyawa Dalam Teripang Sebagai Imunomodulator. *Journal of Pharmaceutical And Sciences*, *5*(1), 33–41. https://doi.org/10.36490/journal-jps.com.v5i1.99

Sifatullah, N., & Zulkarnain. (2021). Jerawat (*Acne vulgaris*): Review Penyakit Infeksi Pada Kulit. *Prosiding Biologi Achieving the Sustainable Development Goals* , *November*, 19–23. http://journal.uin-alauddin.ac.id/index.php/psb

Silvia, Febriyani, A., Nando, R., & Riza, A. (2020). Hubungan Antara Kualitas Tidur Dengan *Acne Vulgaris* Pada Mahasiswa Fakultas Kedokteran Umum Universitas Malahayati Angkatan 2019. *Jurnal Medika Malahayati*, *4*(1), 33–38. https://doi.org/10.35790/ecl.3.3.2015.10445

Silvia, R., Wahyuni, W. T., Rohaeti, E., Aisyah, S., Septaningsih, D. A., Karomah, A. H., & Rafi, M. (2024). *LC-HRMS-Based Metabolomics Approach Reveals Antioxidant Compounds from Centella asiatica Leaves Extracts*. *Indonesian Journal of Chemistry*, *24*(6), 1861–1869. https://doi.org/10.22146/ijc.90782

Silviaa, E., Anggunan, A., Effendi, A., & Nurfaridza, I. (2020). Hubungan Antara Jenis Kelamin Dengan Angka Kejadian Dermatitis Seboroik. *Jurnal Ilmiah Kesehatan Sandi Husada*, *9*(1), 37–46. https://doi.org/10.35816/jiskh.v10i2.216

Silvyana, A. E., Rahayu, F. E., & Febriana, V. (2024). Potensi Aktivitas Emulgel Ekstrak Kulit Manggis (*Garcinia mangostana* L.) yang Mengandung Xanthon Pada Bakteri *Staphylococcus epidermidis* dan *Staphylococcus aureus*. *Jurnal Mandala Pharmacon Indonesia*, *10*(2), 445–450.

Sugiarti, L., Andriyani, D. M., Pratitis, M. P., & Setyani, R. (2020). Aktivitas Antibakteri Fraksi N-Heksan, Etil Asetat dan Air Ekstrak Etanol Daun Parijoto (*Medinilla speciosa* Blume) Terhadap *Propionibacterium acnes* dan *Staphylococcus epidermidis*. *Cendekia Journal of Pharmacy*, *4*(2), 120–130. https://doi.org/10.31596/cjp.v4i2.105

Sulistio, A. D. (2021). Pemanfaatan Daun Pegagan (*Centella asiatica*) menjadi Olahan Keripik. *Jurnal Pengabdian Masyarakat MIPA dan Pendidikan MIPA*, *5*(2), 125–130.

Suryani, N. P. F., Hita, I. P. G. A. P., & Septiari, I. G. A. A. (2023). Skrining Fitokimia Dan Uji Aktivitas Antioksidan Ekstrak Daun Porang (*Amorphophallus muelleri* B.) Dengan Pelarut Ekstraksi Etanol, Etil Asetat Dan N-Heksana. *JOURNAL SCIENTIFIC OF MANDALIKA (JSM) e-ISSN 2745-5955 | p-ISSN 2809-0543*, *4*(9), 179–194. https://doi.org/10.36312/10.36312/vol4iss9pp179-194

Susetyarini, E., & Nurrohman, E. (2022). Fitokimia Ekstrak Dan Rebusan Daun Pegagan (*Centella asiatica* (L.) Urban.) Langkah Awal Mencari Senyawa Potensial Kandidat Immunomodulator. *Jurnal Sains Riset*, *12*(1), 51–58. http://journal.unigha.ac.id/index.php/JSR

Utari, N. N. P. (2023). Literature Review: Ekstrak Daun Pegegan Sebagai Anti Jerawat. *Jurnal Ilmiah Farmasi Akademi Farmasi Jember*, *6*(1), 1–7. https://doi.org/10.53864/jifakfar.v6i1.119

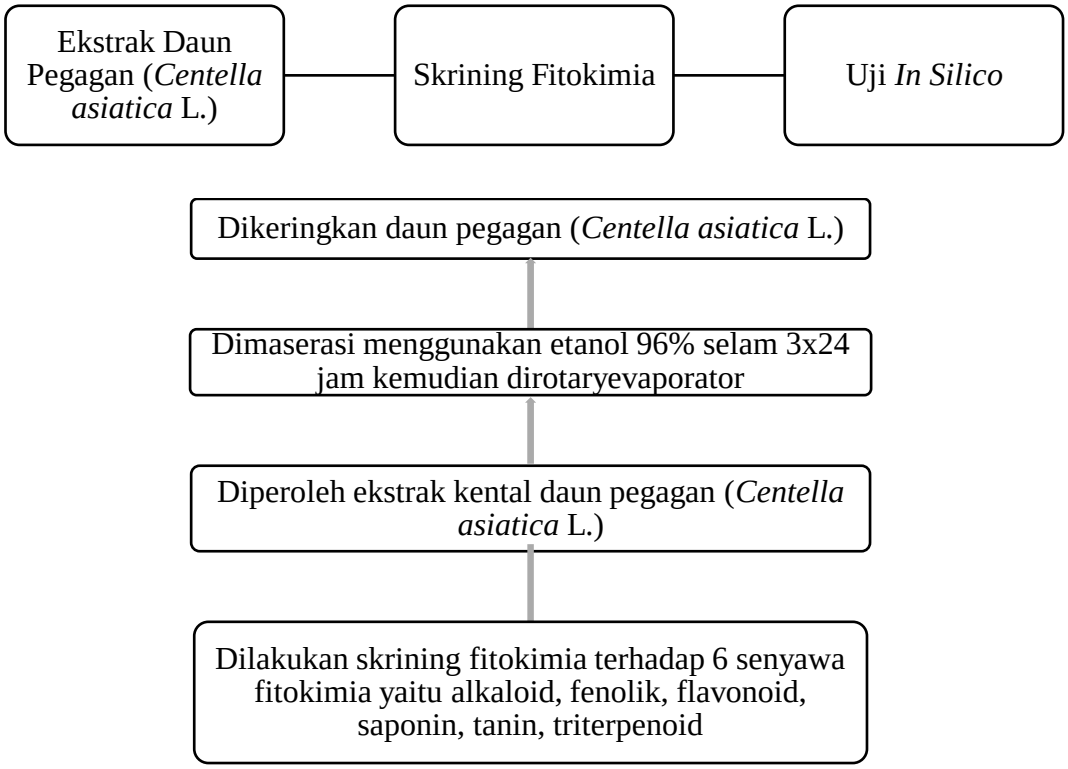
Wijaya, W. H., Widodo, A. A., & Sanfika, C. D. (2023). *Effectiveness of Spironolactone for Acne Vulgaris*. *Jurnal MedScientiae*, *2*(2), 1–8. https://doi.org/10.36452/jmedscientiae.v2i2.2956

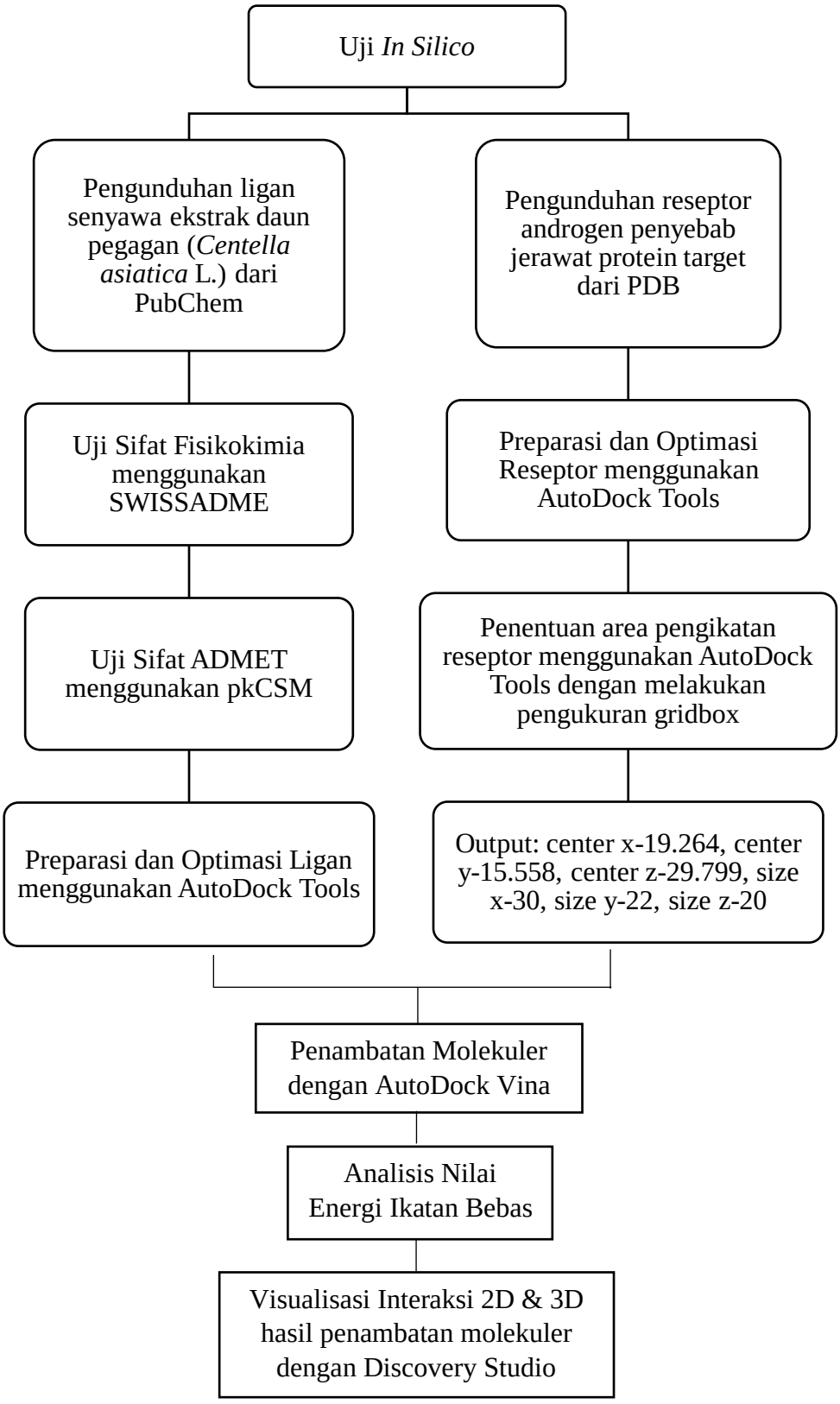
Yulianti, W., Ayuningtyas, G., Martini, R., & Resmeiliana, I. (2021). Pengaruh Metode Ekstraksi Dan Polaritas Pelarut Terhadap Kadar Fenolik Total Daun Kersen (*Muntingia calabura* L). *Jurnal Sains Terapan*, *10*(2), 41–49. https://doi.org/10.29244/jstsv.10.2.41-49

Zulfa, A., & Febrina, E. (2023). Review Artikel: Spironolakton Sebagai Obat Off-Label Untuk Jerawat Pada Wanita Dewasa. *Farmaka*, *21*(3), 419–428.

LAMPIRAN

Lampiran 1. Skema Kerja Penelitian




Uji *In Silico*
Pengunduhan ligan senyawa ekstrak daun pegagan (*Centella asiatica* L.) dari PubChem
Pengunduhan reseptor androgen penyebab jerawat protein target dari PDB
Uji Sifat Fisikokimia menggunakan SWISSADME
Preparasi dan Optimasi Reseptor menggunakan AutoDock Tools
Uji Sifat ADMET menggunakan pkCSM
Penentuan area pengikatan reseptor menggunakan AutoDock Tools dengan melakukan pengukuran gridbox
Preparasi dan Optimasi Ligan menggunakan AutoDock Tools
Output: center x-19.264, center y-15.558, center z-29.799, size x-30, size y-22, size z-20
Penambatan Molekuler dengan AutoDock Vina
Analisis Nilai Energi Ikatan Bebas
Visualisasi Interaksi 2D & 3D hasil penambatan molekuler dengan Discovery Studio

Lampiran 2. Perhitungan Rendemen

- Bobot awal simplisia = 89,8 gram
- Berat ekstrak yang diperoleh =18,6 gram
- Rendemen = $\frac{Berat\ ekstrak\ yang\ diperoleh}{Bobot\ awal\ simplisia}\ x\ 100\%$ (Kusuma & Aprileili, 2022)

  = $\frac{18{,}6\ gr}{89{,}8\ gr}\ x\ 100\%$

  = 20,71 %

Lampiran 3. Dokumentasi Skrining Fitokimia



Penimbangan Simplisia Daun Pegagan (*Centella asiatica* L.)



Proses Maserasi Simplisia Menggunakan Etanol 96%



Proses Evaporasi untuk Memperoleh Ekstrak Kental



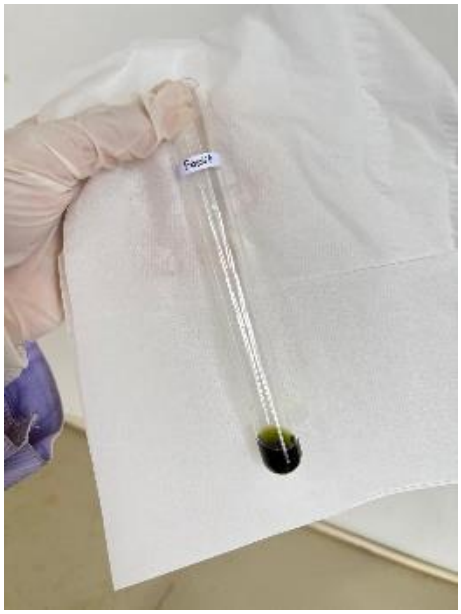
Penimbangan Ekstrak Kental yang Diperoleh



Hasil Uji Senyawa Alkaloid menggunakan Pereaksi Dragendorff



Hasil Uji Senyawa Alkaloid menggunakan Pereaksi Wagner



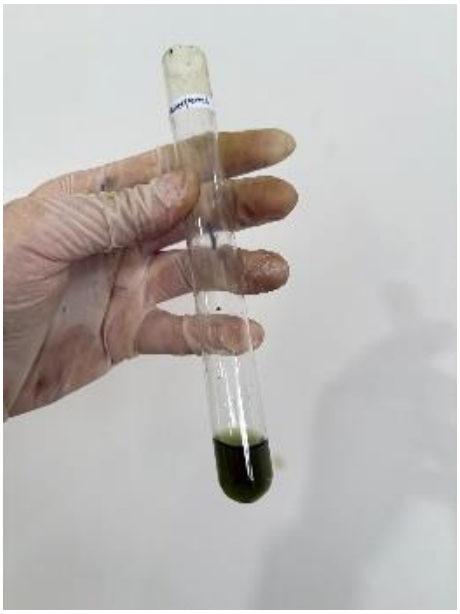
Hasil Uji Senyawa Fenolik



Hasil Uji Senyawa Flavonoid

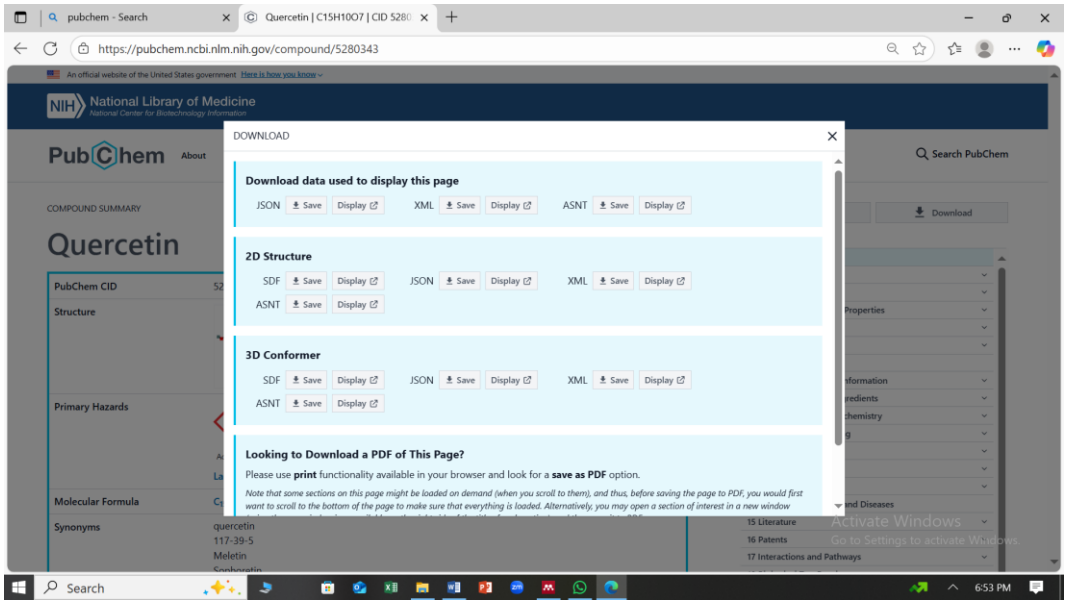


Hasil Uji Senyawa Saponin

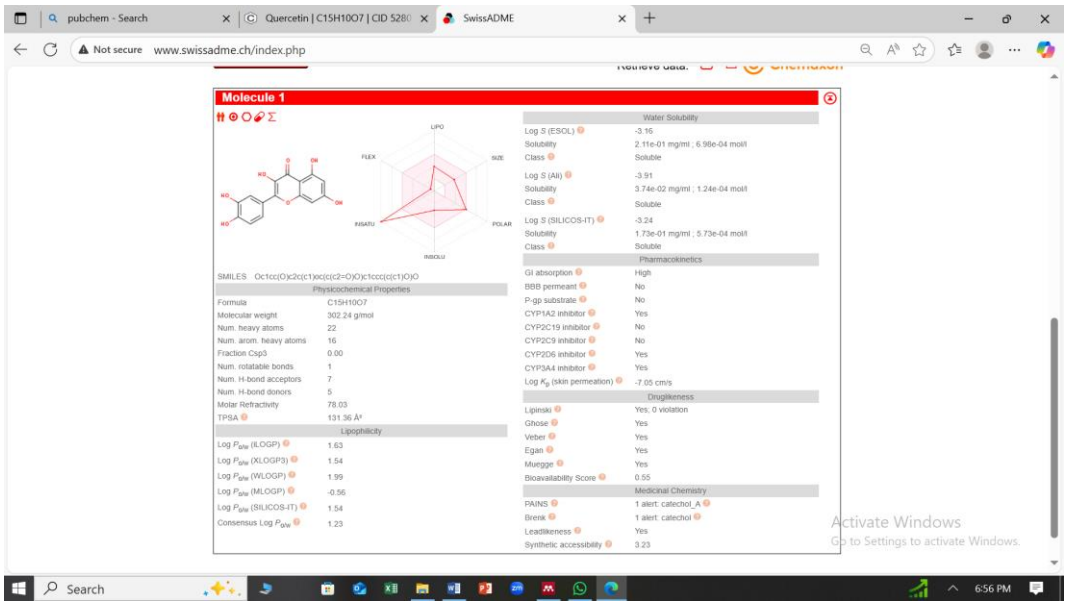


Hasil Uji Senyawa Triterpenoid

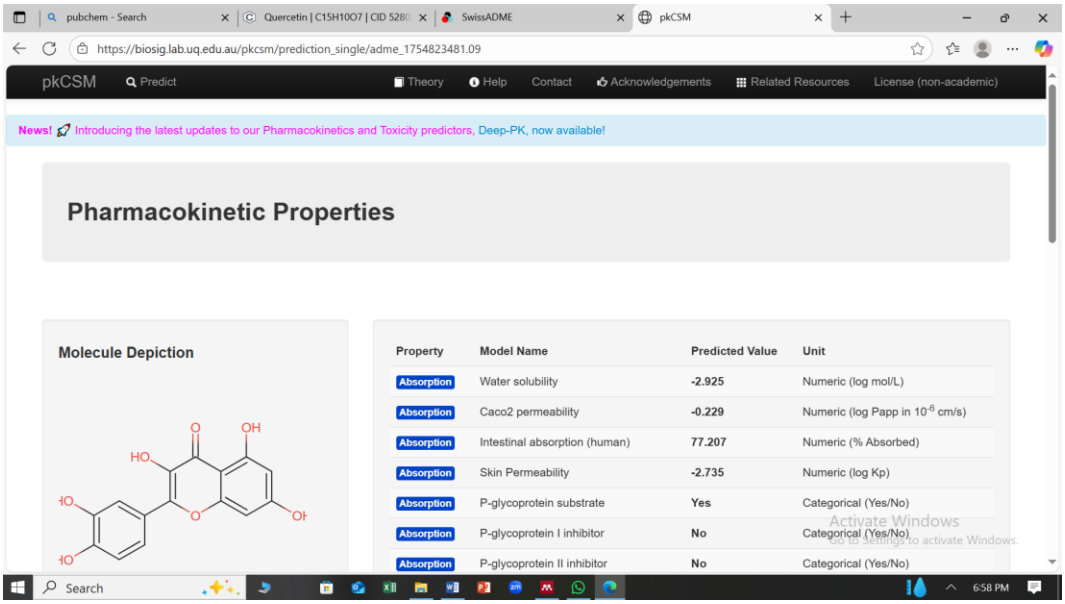
Lampiran 4. Dokumentasi Pengujian *In Silico*



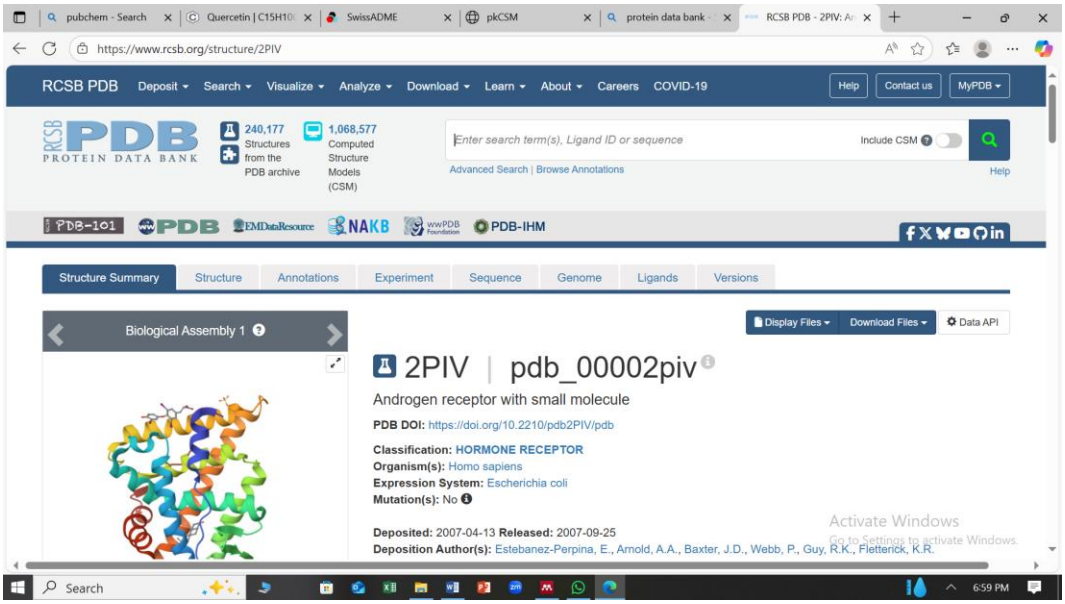
Pengunduhan Ligan Uji pada *website PubChem*



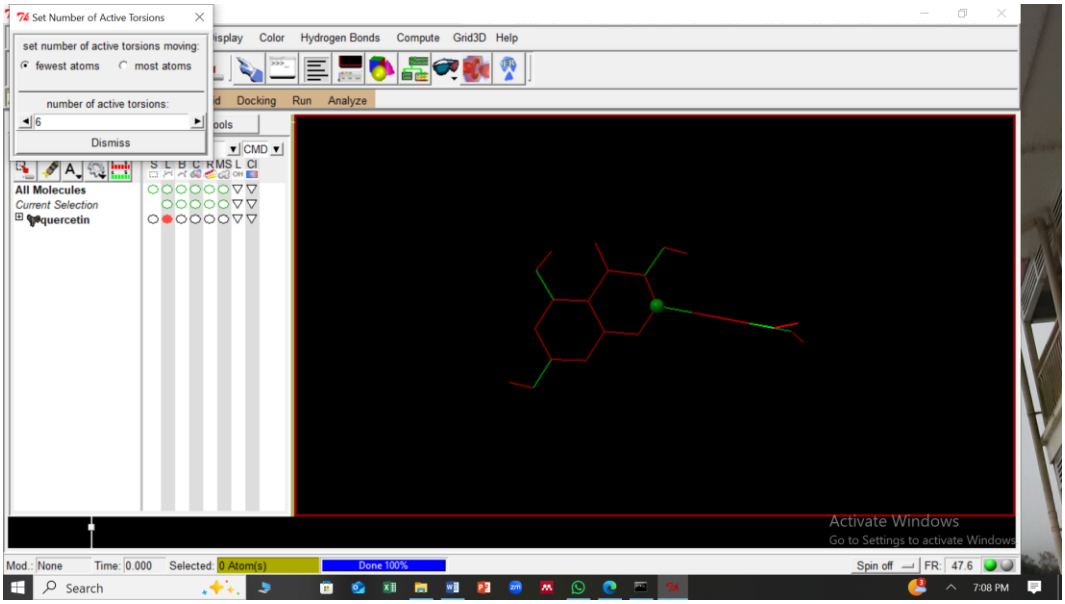
Pengujian *Lipinski rule of 5* menggunakan *website SwissADME*



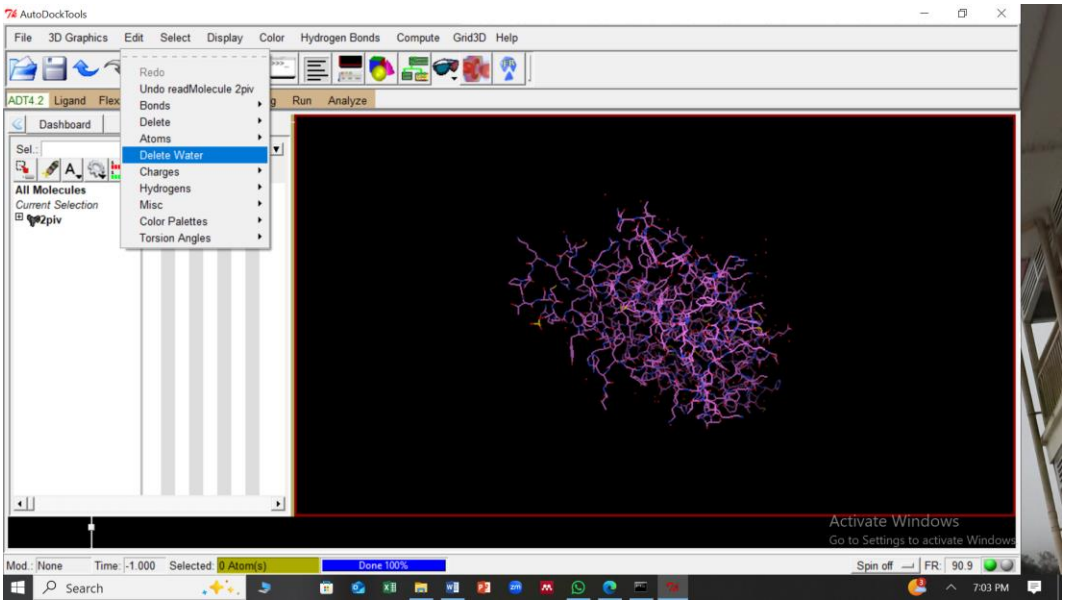
Pengujian AMDET menggunakan *website pkCSM*



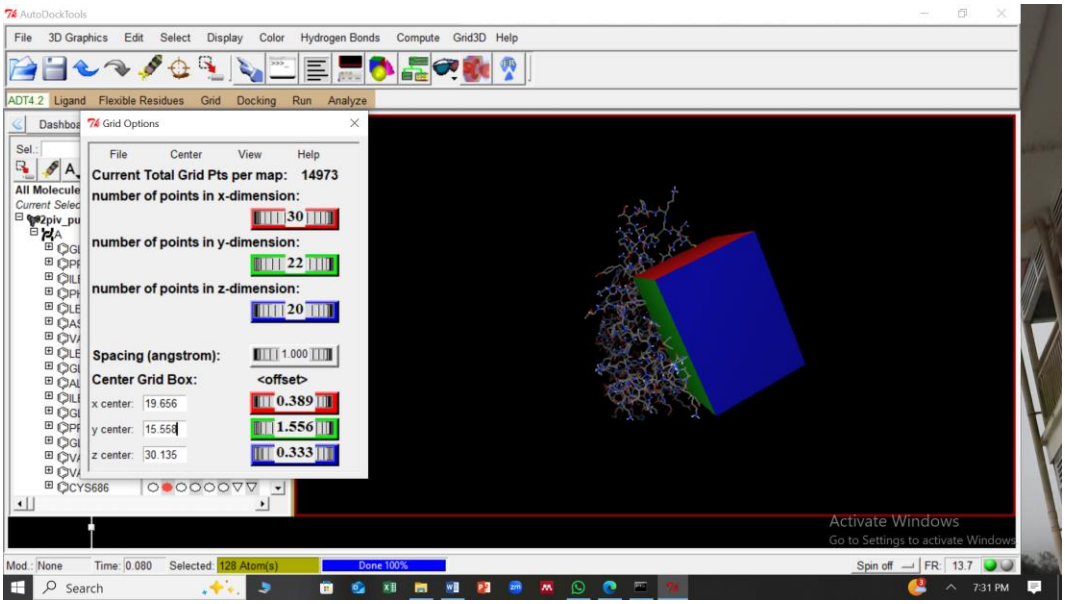
Pengunduhan Protein Target yaitu Reseptor Androgen dengan Kode 2PIV



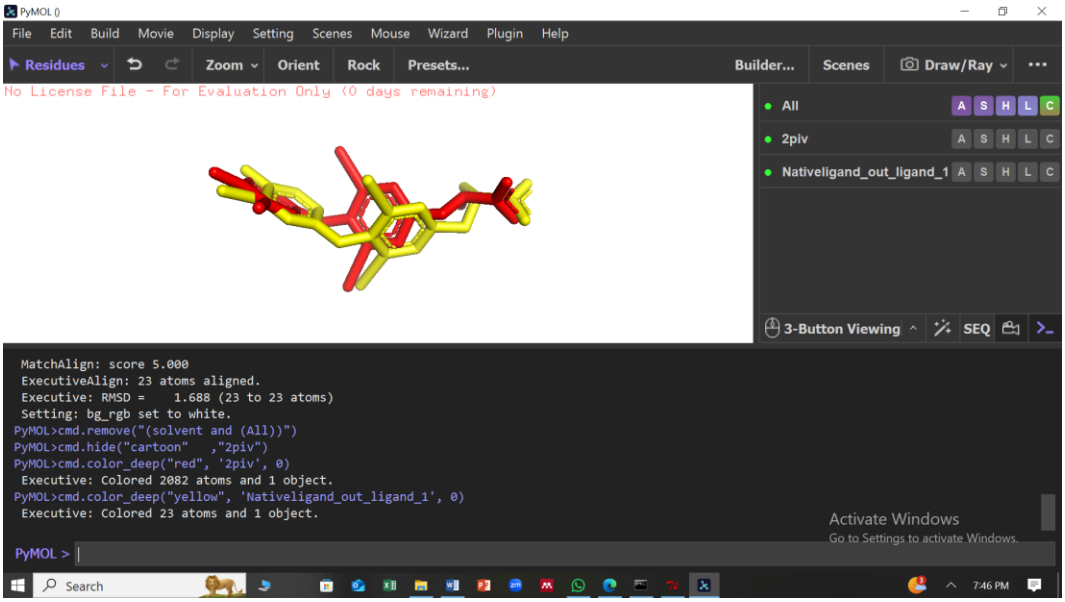
Preparasi dan Optimasi Ligan Uji menggunakan *AutoDock Tools*



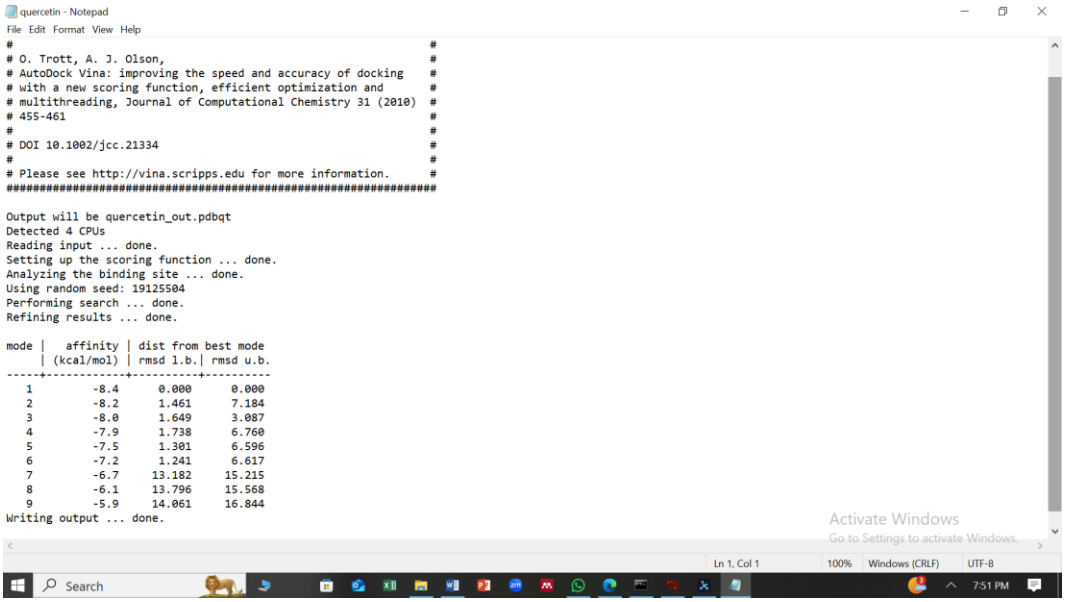
Preparasi dan Optimasi Protein Target menggunaan *AutoDock Tools*



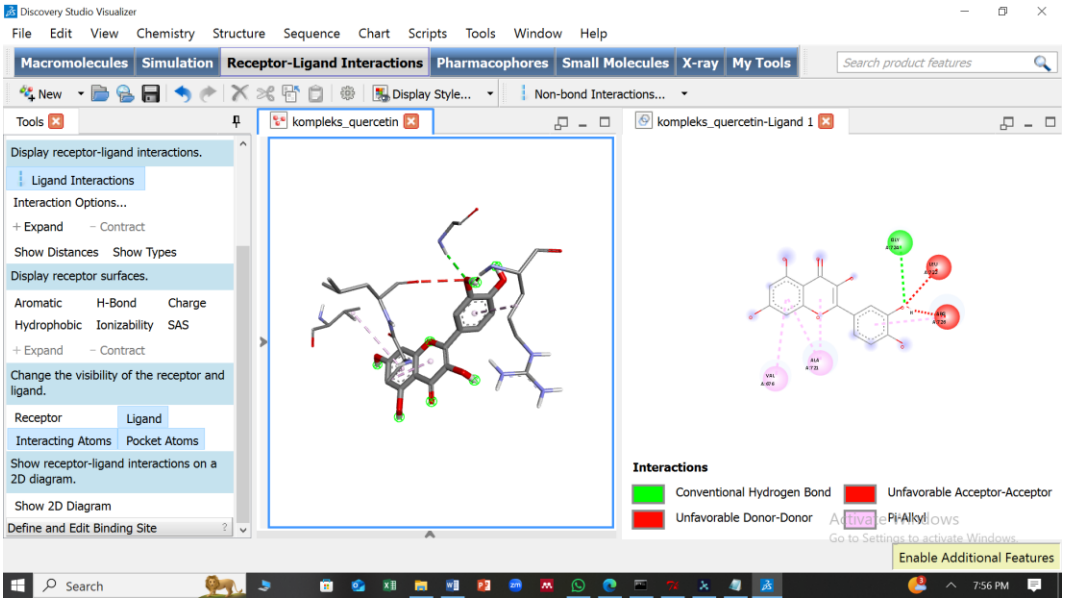
Pengukuran *grid box* menggunakan *Auto Dock Tools*



Validasi Metode *Docking* Menggunakan *PyMol*



Molecular Docking menggunakan *AutoDock Vina*



Visualisasi Hasil *Molecular Docking* menggunakan *Discovery Studio Visualizer*