

**Penggunaan Metode *In Silico* pada Formulasi Insektisida
Alami Berbasis Minyak Serai Wangi dan Minyak Cengkeh
serta Uji Aktivitas terhadap Serangga Ulat Grayak
(*Spodoptera litura*)**

SKRIPSI

oleh:
PUTRI NINDYASIWI
135090201111022



JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2017

**Penggunaan Metode *In Silico* pada Formulasi Insektisida
Alami Berbasis Minyak Serai Wangi dan Minyak Cengkeh
serta Uji Aktivitas terhadap Serangga Ulat Grayak
(*Spodoptera litura*)**

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Kimia

oleh:

**PUTRI NINDYASIWI
135090201111022**



**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2017**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

Penggunaan Metode *In Silico* pada Formulasi Insektisida Alami Berbasis Minyak Serai Wangi dan Minyak Cengkeh serta Uji Aktivitas terhadap Serangga Ulat Grayak (*Spodoptera litura*)

oleh:

PUTRI NINDYASIWI
135090201111022

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji
pada tanggal.....
dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Kimia

Pembimbing I

Pembimbing II

Dr. Warsito, MS

NIP. 19590712 198503 1 004

Dr. Edi Priyo Utomo, MS

NIP. 19571227 198603 1 003

Mengetahui,
Ketua Jurusan Kimia
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya

Masruri, S.Si, M.Si, Ph.D

NIP. 19731020 200212 1 001

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Putri Nindyasiwi
NIM : 135090201111022
Jurusan : Kimia
Penulis skripsi berjudul:

Penggunaan Metode *In Silico* pada Formulasi Insektisida Alami Berbasis Minyak Serai Wangi dan Minyak Cengkeh serta Uji Aktivitas terhadap Serangga Ulat Grayak (*Spodoptera litura*)

Dengan ini menyatakan bahwa:

1. Isi dari skripsi yang saya buat adalah benar-benar karya sendiri dan tidak menjiplak karya orang lain, selain nama-nama yang termaktub di isi dan tertulis di daftar pustaka dalam skripsi ini.
2. Apabila dikemudian hari ternyata skripsi yang saya tulis terbukti hasil jiplakan, maka saya akan bersedia menanggung segala resiko yang akan saya terima.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, Agustus 2017
Yang menyatakan,

(Putri Nindyasiwi)
NIM. 135090201111022

Penggunaan Metode *In Silico* pada Formulasi Insektisida Alami Berbasis Minyak Serai Wangi dan Minyak Cengkeh serta Uji Aktivitas terhadap Serangga Ulat Grayak (*Spodoptera litura*)

ABSTRAK

Insektisida alami merupakan salah satu jenis pestisida yang berbahan dasar alami berasal dari tumbuhan sebagai alternatif pestisida sintesis untuk membunuh serangga. Dalam penelitian ini telah dilakukan uji aktivitas insektisida alami berbasis minyak serai wangi dan minyak cengkeh. Formulasi insektisida ditentukan dengan pendekatan *in silico* menggunakan perangkat lunak *AutoDock*. Pada proses *docking* digunakan reseptor ulat grayak dengan kode PDB 2DJC, sedangkan ligan yang digunakan adalah ligan geraniol, sitronelal, sitronelol dan eugenol. Nilai K_i hasil *docking* digunakan untuk penentuan nilai IC_{50} . Dari nilai IC_{50} ini dipadukan dengan kadar komponen utama minyak serai wangi dan minyak cengkeh yang digunakan untuk menentukan formulasi insektisida. Uji aktivitas insektisida diaplikasikan terhadap hama serangga ulat grayak (*S.litura*) dengan metode kontak racun dan kontak daun. Pengujian ini dilakukan selama 24 jam. Dari hasil uji *in silico* diperoleh formula insektisida minyak serai wangi dan minyak cengkeh yaitu 4 : 1. Hasil uji aktivitas konsentrasi 0,25% pada metode kontak racun dan 1% pada metode kontak daun efektif digunakan sebagai insektisida. Nilai LC_{50} dan LC_{90} berdasarkan analisis probit menggunakan SPSS untuk metode kontak racun adalah 0,052% dan 0,194%, sedangkan LC_{50} dan LC_{90} untuk metode kontak daun adalah 0,308% dan 0,476%.

Kata Kunci: pemodelan molekuler, minyak serai wangi, minyak cengkeh, aktivitas insektisida, LC_{50}

In Silico Method on Natural Insecticide Formulation Based Citronella Oil and Clove Oil and Activity Test on Grayak Caterpillar Insects (*Spodoptera litura*)

ABSTRACT

Natural insecticide is one of nature-based pesticide from plants as an alternative of synthetic pesticide to kill insect. In this research has been tested the activity of natural insecticide based on citronella oil and clove oil. Insecticidal formulations were determined using the in silico approach using AutoDock software. Docking process used receptor *Spodoptera litura* with PDB code 2DJC, while ligands used are geraniol ligands, citronellal, citronellol and eugenol. Ki value of docking result is used for determination IC₅₀ value. The value of IC₅₀ is combined with the content of the main components of the lemon grass oil and clove oil used to determine insecticide formulations. Insecticidal activity test was applied to *Spodoptera litura* insect by contact method of toxic and leaf contact. This test is done for 24 hours. From the results of in silico test, the insecticide formula of citronella oil and clove oil is 4: 1. The result of 0.25% concentration activity test on toxic contact method and 1% on leaf contact method is effective as insecticide. The values of LC₅₀ and LC₉₀ based on probit analysis using SPSS for toxic contact method were 0.052% and 0.194%, whereas LC₅₀ and LC₉₀ for leaf contact method were 0.308% and 0.476%.

Keywords: molecular modeling, citronella oil, clove oil, insecticidal activity, LC₅₀

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah SWT karena limpahan rahmat dan hidayahnya sehingga penelitian serta penulisan tugas akhir yang berjudul **“Penggunaan Metode *In Silico* pada Formulasi Insektisida Alami Berbasis Minyak Serai Wangi dan Minyak Cengkeh serta Uji Aktivitas terhadap Serangga Ulat Grayak (*Spodoptera litura*)”** dapat terselesaikan dengan baik. Penulisan tugas akhir ini merupakan salah satu syarat kelulusan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dalam bidang Kimia di Fakultas MIPA Universitas Brawijaya.

Penulisan tugas akhir ini dapat terlaksana dengan baik atas bantuan, bimbingan, dan saran dari semua pihak. Ungkapan terima kasih penulis sampaikan kepada:

1. Dr. Warsito, MS selaku dosen pembimbing I atas segala bimbingan, pengarahan, perhatian dan kesabaran yang diberikan kepada penulis selama masa penelitian maupun penyusunan naskah skripsi.
2. Dr. Edi Priyo Utomo, MS selaku dosen pembimbing II, atas segala bimbingan dan pengarahan yang telah diberikan kepada penulis selama masa penelitian maupun penyusunan naskah skripsi.
3. Masruri, S.Si, M.Si, Ph.D selaku Ketua Jurusan Kimia Universitas Brawijaya yang telah memberikan arahan dan nasehat dalam hal perkuliahan secara umum selama menempuh pendidikan di Jurusan Kimia Universitas Brawijaya.
4. Drs. Sutrisno, M.Si selaku dosen pembimbing akademik yang telah memberikan bimbingan, pengarahan, dan nasihat akademik kepada penulis selama menempuh pendidikan di Jurusan Kimia Universitas Brawijaya.
5. Dosen Penguji Tugas Akhir yang telah memberikan kritik dan saran kepada penulis.
6. Dr. Elvina Dhiaul Iftitah, S.Si, M.Si selaku kepala laboratorium Kimia Organik Universitas Brawijaya yang telah memberikan sarana prasarana kepada penulis selama penelitian berlangsung.

7. Pak Wiji dan Pak Hadi selaku laboran kimia organik yang telah memberikan bantuan dan pelayanan kepada penulis selama penelitian.
8. Seluruh staf pengajar, karyawan, dan laboran dilingkungan Jurusan Kimia Universitas Brawijaya atas segala ilmu dan bantuan yang diberikan kepada penulis.
9. Bapak Warsito, Ibu Sunarsih, Kakak Bagus Pratama serta seluruh keluarga besar penulis, yang telah memberikan doa, motivasi, nasihat, dukungan moril maupun materiil yang diberikan kepada penulis selama penelitian berlangsung hingga penulisan naskah skripsi.
10. Sahabat tercinta Dessy Puspita Sari, Novia Eka Setyatama, S.Si, Oki Mandalia Antasari, S.Si dan Rama Khaleda Widana yang telah memberikan semangat, doa dan membantu dengan tulus dalam proses penelitian dan penulisan naskah skripsi.
11. Tim bimbingan Berliana Nur Kholila, Rahayu Kinanthi Widisetyanti, R. Ay. Farah Ardiansyah Rukmana, Ferdian Dwi Cahyanto dan Puspitasari yang telah memberikan semangat, bantuan, dukungan dan menemani penulis dengan sabar.
12. Seluruh teman-teman kimia di laboratorium kimia organik, teman-teman satu angkatan seperjuangan dan yang telah terlebih dahulu menyelesaikan studi, teman-teman mahasiswa di Jurusan Kimia, serta semua pihak yang telah memberikan pengalaman, pelajaran, hiburan, dukungan, doa dan semangat kepada penulis.

Dalam penulisan naskah skripsi ini penulis menyadari bahwa penyusunan skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, oleh karena itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun agar penulisan naskah skripsi ini bisa menjadi lebih baik lagi. Penulis juga berharap skripsi ini dapat memberikan sedikit manfaat dan menambah wawasan bagi pembacanya dalam perkembangan ilmu pengetahuan

Malang, Agustus 2017

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Penggunaan Komputasi dalam Pengembangan Formulasi Insektisida Alami	7
2.2 Potensi Minyak Atsiri sebagai Insektisida Alami	9
2.3 Hama Ulat Grayak (<i>Spodoptera litura</i>)	12
2.4 <i>Gas Chromatography-Mass Spectrometry</i>	13
2.5 Hipotesis	14
BAB III METODE PENELITIAN	
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	15
3.2 Alat dan Bahan Penelitian	15
3.3 Tahapan Penelitian	15
3.4 Prosedur Kerja	
3.4.1 Karakterisasi Minyak Atsiri menggunakan GC-MS	16
3.4.2 Penentuan nilai Ki dengan metode <i>In Silico</i>	16
3.4.2.1 Persiapan Ligan	16
3.4.2.2 Persiapan Makromolekul	17
3.4.2.3 <i>Docking</i> Molekuler	17
3.4.3 Pembuatan Laturan Formulasi Insektisida	

	Alami berbasis Minyak Atsiri	18
3.4.4	Uji Aktivitas Insektisida Alami berbasis Minyak Atsiri	19
3.4.5	Analisis Data	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		
4.1	Karakterisasi Minyak Atsiri menggunakan GC-MS	21
4.2	Optimasi Ligand an Makromolekul	23
4.3	<i>Docking</i> Molekuler	25
4.4	Formulasi Insektisida Alami berbasis Minya Atsiri	28
4.5	Uji Aktivitas Insektisida Alami berbasis Minyak Atsiri	29
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN		
5.1	Kesimpulan	35
5.2	Saran	35
DAFTAR PUSTAKA		37
LAMPIRAN		43

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Tahapan <i>Docking</i>	7
Gambar 2.2	Serai Wangi	10
Gambar 2.3	Struktur a. Sitronelal b. Geraniol c. Sitronelol	11
Gambar 2.4	Struktur Eugenol	11
Gambar 2.5	Ulat Grayak (<i>Spodoptera litura</i>)	12
Gambar 4.1	TIC Minyak Serai Wangi	21
Gambar 4.2	TIC Minyak Cengkeh	22
Gambar 4.3	Hasil Optimasi Ligan dan Makromolekul	24
Gambar 4.4	Hasil <i>Single Ligand Docking</i>	26
Gambar 4.5	Hasil <i>Multiple Ligand Docking</i>	27
Gambar 4.6	Interaksi Makromolekul 2DJC dengan Ligan Eugenol dan Sitronelal	28
Gambar 4.7	Grafik Hubungan Waktu Setelah Aplikasi dengan %Mortalitas Metode Kontak Racun	31
Gambar 4.8	Grafik Hubungan Waktu Setelah Aplikasi dengan %Mortalitas Metode Kontak Daun	32
Gambar L.1	TIC Minyak Serai Wangi	49
Gambar L.2	TIC Minyak Cengkeh	49
Gambar L.3	Hasil <i>Multiple Ligand Docking</i>	50
Gambar L.4	Interaksi Makromolekul 2DJC dengan Ligan Eugenol dan Sitronelal	50
Gambar L.5	Grafik Hubungan Waktu Setelah Aplikasi dengan %Mortalitas Metode Kontak Racun	51
Gambar L.6	Grafik Hubungan Waktu Setelah Aplikasi dengan %Mortalitas Metode Kontak Daun	53
Gambar L.7	Formulasi Insektisida Alami	56
Gambar L.8	Pengukuran Panjang Ulat Grayak	56
Gambar L.9	Penimbangan Ulat Grayak	56
Gambar L.10	Uji Aktivitas Insektisida Metode Kontak Racun dan Kontak Daun	57
Gambar L.11	Kematian <i>S.litura</i> Setelah Pengaplikasian Insektisida	57

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1	Komponen Penyusun Minyak Serai Wangi	21
Tabel 4.2	Komponen Penyusun Minyak Cengkeh	23
Tabel 4.3	Data Hasil Analisis Optimasi Ligan	24
Tabel 4.4	Nilai Ki Hasil <i>Docking</i> Masing-masing Ligan dengan Makromolekul	26
Tabel 4.5	Nilai Ki Hasil <i>Multiple Ligand Docking</i>	27
Tabel 4.6	Nilai IC ₅₀ pada Masing-masing Formula	29
Tabel 4.7	Mortalitas Larva <i>S.litura</i> pada Metode Kontak Racun	30
Tabel 4.8	Mortalitas Larva <i>S.litura</i> pada Metode Kontak Daun	30
Tabel L.1	Komposisi Formula Insektisida Alami	46
Tabel L.2	Nilai Ki Hasil <i>Multiple Ligand Docking</i>	50
Tabel L.3	Mortalitas <i>S.litura</i> pada Metode Kontak Racun	51
Tabel L.4	Mortalitas <i>S.litura</i> pada Metode Kontak Daun	52
Tabel L.5	Penentuan LC ₅₀ dan LC ₉₀ Insektisida menggunakan Metode Kontak Racun	53
Tabel L.6	Penentuan LC ₅₀ dan LC ₉₀ Insektisida menggunakan Metode Kontak Daun	54

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran A: Skema Kerja	43
A.1 Diagram Alir Penelitian	43
A.2 Uji Aktivitas Insektisida Alami	44
Lampiran B: Perhitungan	45
B.1 Penentuan Konsentrasi Sitronelal dan Eugenol berdasarkan Nilai Ki	45
B.2 Penentuan Formulasi Insektisida	45
B.3 Perbandingan Konsentrasi <i>In Silico</i> dan <i>In Vitro</i>	47
Lampiran C: Data hasil Analisis	49
C.1 Analisis menggunakan GC-MS	49
C.2 Analisis Hasil <i>Docking</i>	50
Lampiran D: Hasil Uji Aktivitas Insektisida	51
D.1 Mortalitas <i>S.litura</i> terhadap Metode Kontak Racun dan Kontak Daun	51
D.2 Penentuan LC ₅₀	53
Lampiran E: Dokumentasi Penelitian	56