

**STUDI *IN SILICO* PENAMBATAN MOLEKUL α -MANGOSTIN
TERHADAP PROTEIN PEMBENTUKAN BIOFILM PADA
Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus (MRSA)**

SKRIPSI

MELITA PERMATA SARI

A 252 020



**SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA
YAYASAN HAZANAH
BANDUNG**

2026

**STUDI *IN SILICO* PENAMBATAN MOLEKUL α -MANGOSTIN
TERHADAP PROTEIN PEMBENTUKAN BIOFILM PADA
Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus (MRSA)**

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

MELITA PERMATA SARI

A 252 020



SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA

YAYASAN HAZANAH

BANDUNG

2026

**STUDI *IN SILICO* PENAMBATAN MOLEKUL α -MANGOSTIN
TERHADAP PROTEIN PEMBENTUKAN BIOFILM PADA *Methicillin-
Resistant Staphylococcus aureus* (MRSA)**

MELITA PERMATA SARI

A 252 020

Juli 2026

Disetujui oleh:

Pembimbing



Umi Baroroh, S.Si., M.biotek

Pembimbing



Himalaya Wana Kelana, M.Pd

Kutipan atau saduran baik sebagian ataupun seluruh naskah, harus menyebut nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Skripsi ini dipersembahkan untuk kedua orang tua tercinta, sumber doa, kekuatan, dan kasih yang tulus tanpa akhir. Semoga Allah membalas segala pengorbanan dengan surga-Nya. " Karena sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan."(QS. Al-Insyirah: 5–6). " Dan bahwa manusia hanya memperoleh apa yang telah diusahakannya." (QS. An-Najm: 39).

ABSTRAK

Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus (MRSA) merupakan bakteri patogen yang mampu membentuk biofilm. Biofilm merupakan komunitas bakteri yang terbungkus dalam matriks polimer ekstraseluler sehingga dapat meningkatkan resistensi terhadap antibiotik dan menyebabkan infeksi persisten yang sulit diatasi. Salah satu senyawa alami yang berpotensi sebagai antibiofilm adalah α -mangostin yang berasal dari kulit buah manggis (*Garcinia mangostana* L.). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi α -mangostin terhadap protein pembentuk biofilm pada MRSA secara *in silico*. Penelitian dilakukan melalui preparasi protein target IcaA, IcaB, IcaC, IcaD, ArgB, ArgC, SarA, ClfA, dan FnbA, kemudian dilanjutkan dengan penambatan molekul menggunakan metode *blind docking* menggunakan AutoDock Vina, serta analisis visualisasi interaksi protein ligan menggunakan BIOVIA Discovery Studio. Hasil penelitian menunjukkan bahwa α -mangostin mampu berikatan dengan seluruh protein target dengan nilai energi ikatan berkisar antara -6,9 hingga -8,3 kcal/mol. Afinitas pengikatan terbaik diperoleh pada protein FnbA (-8,2 kcal/mol) dan ClfA (-8,3 kcal/mol). Visualisasi interaksi menunjukkan bahwa α -mangostin berinteraksi dengan protein target melalui berbagai jenis interaksi, meliputi ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, dan interaksi elektrostatik, dengan interaksi hidrofobik sebagai jenis interaksi yang paling dominan. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa α -mangostin berpotensi sebagai kandidat senyawa antibiofilm terhadap MRSA melalui penghambatan protein yang berperan dalam adhesi dan pembentukan biofilm.

Kata kunci: α -mangostin, biofilm, *blind docking*, *in silico*, MRSA, penambatan molekul.

ABSTRACT

Methicillin-resistant Staphylococcus aureus (MRSA) is a pathogenic bacterium capable of forming biofilms. Biofilms are bacterial communities encased in an extracellular polymeric matrix, which enhances antibiotic resistance and leads to persistent, difficult-to-treat infections. One natural compound with potential antibiofilm activity is α -mangostin, derived from the pericarp of the mangosteen fruit (Garcinia mangostana L.). This study aimed to investigate the potential of α -mangostin to target biofilm-forming proteins in MRSA using in silico methods. The research involved preparing the target proteins IcaA, IcaB, IcaC, IcaD, ArgB, ArgC, SarA, ClfA, and FnbA followed by molecular docking using the blind docking method with AutoDock Vina, and analyzing protein-ligand interaction visualizations using BIOVIA Discovery Studio. The results demonstrated that α -mangostin could bind to all target proteins, with binding energy values ranging from -6.9 to -8.3 kcal/mol. The highest binding affinities were observed with the FnbA (-8.2 kcal/mol) and ClfA (-8.3 kcal/mol) proteins. Interaction visualizations revealed that α -mangostin interacts with the target proteins through various mechanisms including hydrogen bonding, hydrophobic interactions, and electrostatic interactions with hydrophobic interactions being the most dominant type. These findings indicate that α -mangostin is a promising candidate for an antibiofilm agent against MRSA, acting through the inhibition of proteins involved in adhesion and biofilm formation.

Keywords: *α -mangostin, biofilm, blind docking, in silico, molecular docking, MRSA.*

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim,

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala berkah rahmat dan ridho-Nya penulis dapat menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi yang berjudul “**Studi *In Silico* Penambatan Molekul α -Mangostin Terhadap Protein Pembentukan Biofilm pada *Methicillin-resistant Staphylococcus aureus* (MRSA)**”. Penelitian dan penulisan skripsi ini dilakukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk mendapatkan gelar sarjana pada Program Studi Sarjana Farmasi Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Dengan penuh rasa hormat, penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada dosen pembimbing Umi Baroroh, S.Si., M.Biotek dan Himalaya Wana Kelana, M.Pd., atas ketulusan dalam memberikan bimbingan, inspirasi, dukungan moral, serta pengorbanan waktu yang sangat berharga. Dalam kesempatan yang istimewa ini, penulis juga ingin menyampaikan rasa terima kasih dan penghargaan yang mendalam kepada:

1. Dr. apt. Adang Firmansyah, M.Si., selaku Ketua Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.
2. Dr. apt. Diki Prayugo, M.Si., selaku wakil ketua I Bidang Akademik.
3. Dr. apt. Hesti Riasari, M.Si., selaku Ketua Program Studi Sarjana Farmasi.
4. Dr. Syarif Hamdani, M.Si., selaku dosen wali yang telah banyak membimbing, memberikan arahan dan juga nasihat selama melaksanakan perkuliahan.
5. Ibu Siti Maryunah dan ayah Suwito dan adik Elisa Puspita Sari yang selalu memberikan dukungan dan semangat sepenuh hati sedari awal sehingga Skripsi ini bisa terselesaikan dengan baik.
6. Kepada seluruh teman seperjuangan Angkatan 25, terimakasih atas kebersamaan, dukungan, pertukaran ilmu, serta persahabatan yang tulus dan akan selalu penulis kenang.
7. Seluruh dosen, staf administrasi, serta seluruh karyawan Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia atas ilmu, pengalaman dan bantuan kepada penulis selama penelitian.

Dalam penulisan Skripsi ini penulis menyadari masih banyak kekurangan dalam karya ini karena keterbatasan pengetahuan. Dengan kerendahan hati, penulis mengharapkan kritik dan saran konstruktif untuk perbaikan di masa depan. Semoga skripsi ini bermanfaat bagi penulis dan pembaca.

Bandung, Juli 2026

Penulis

DAFTAR ISI

KUTIPAN.....	i
PERSEMBAHAN.....	ii
ABSTRAK.....	iii
<i>ABSTRACT</i>	iv
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	3
1.2 Identifikasi Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Kegunaan Penelitian.....	3
1.5 Waktu dan Tempat Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Manggis (<i>Gracinia mangostana</i> L.).....	4
2.2.1 Klasifikasi Tanaman Manggis.....	4
2.2 Mangostin.....	5
2.3 <i>Staphylococcus aureus</i>	7
2.3.1 Klasifikasi <i>Staphylococcus aureus</i>	8
2.3.2 Biofilm pada <i>Staphylococcus aureus</i>	8
2.3.3 Protein Target Pembentuk Biofilm.....	9
2.4 Resistensi Antibiotik yang Dimediasi Biofilm.....	10
2.5 Asam Amino.....	10
2.6 Pendekatan <i>In Silico</i> dan Penambatan Molekul.....	11
BAB III TATA KERJA.....	13
3.1 Alat.....	13
3.2 Bahan.....	13
3.3 Metode Penelitian.....	13
3.3.1 Pengambilan Struktur Protein Target.....	13
3.3.2 Pembersihan, Perbaikan dan Preparasi Protein Target.....	14
3.3.3 Pemilihan dan Preparasi Ligan.....	14
3.3.4 Penentuan Grid Box Pada Protein dan Ligan.....	14
3.3.5 Proses Penambatan molekul.....	15
3.3.6 Visualisasi dan Analisis Interaksi.....	15
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	16
4.1 Analisis Nilai Energi ikatan α -mangostin terhadap Protein Target Biofilm <i>Staphylococcus aureus</i>	16
4.4.1 Pengambilan Struktur Protein Target.....	16

4.1.2 Pembersihan, Perbaikan dan Preparasi Protein Target.....	17
4.1.3 Pemilihan dan Preparasi Ligan.....	19
4.1.4 Penentuan Grid Box Pada Protein dan Ligan.....	20
4.1.5 Proses Penambatan molekul.....	21
4.2 Analisis Potensi α -Mangostin sebagai Inhibitor Pembentukan Biofilm pada <i>Staphylococcus aureus</i> Berdasarkan Interaksi Molekuler.....	28
4.2.1 Visualisasi dan Analisis Interaksi.....	28
BAB V PENUTUP.....	46
5.1 Simpulan.....	46
5.2 Alur Penelitian Selanjutnya.....	46
DAFTAR PUSTAKA	47
LAMPIRAN.....	53

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1 Kode Asam Amino.....	10
4.1 Hasil Evaluasi dan Pemilihan Model Terbaik Dari Masing-Masing Protein Target.....	18
4.2 Nilai Energi Ikatan Hasil Penambatan Molekul α -Mangostin terhadap Protein Pembentukan Biofilm MRSA.....	21
4.3 Hasil Pengelompokan Pose Penambatan Molekul α -Mangostin terhadap Protein Pembentukan Biofilm MRSA.....	23
4.4 Perbandingan Nilai Energi ikatan α -Mangostin dan Kurkumin terhadap Protein Pembentukan Biofilm MRSA.....	27
4.5 Perbandingan Jumlah Interaksi α -Mangostin dan Kurkumin terhadap Protein Pembentukan Biofilm MRSA.....	28
4.6 Perbandingan Residu Asam Amino yang Berinteraksi secara Nonkovalen antara α -Mangostin dan Kurkumin terhadap Protein Pembentukan Biofilm MRSA.....	29
4.7 Visualisasi Dua Dimensi (2D) Interaksi α -Mangostin dan Kurkumin dengan Protein Pembentukan Biofilm MRSA.....	39

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Buah Manggis	4
2.2 Struktur Mangostin.....	7
2.3 Bakteri <i>Staphylococcus Aureus</i>	8
2.4 Mekanisme Pembentukan Biofilm.....	9
4.1 Struktur Protein Target	17
4.2 Struktur Protein Target Setelah di Preparasi.....	19
4.3 Hasil Preparasi Ligan.....	20

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. Hasil Penambatan Molekuler.....	53
2. Hasil Visualisasi 2D.....	62

DAFTAR PUSTAKA

- Akash, S., Aovi, F. I., Azad, A. K., Kumer, A., Chakma, U., Islam, R., Mukerjee, N., Rahman, M., Bayıl, I., Rashid, S., & Sharma, R. (2023). *A drug design strategy based on molecular docking and molecular dynamics simulations applied to development of inhibitor against triple-negative breast cancer by Scutellareinderivatives*. 1–23. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0283271>
- Aslantaş, Ö., & Demir, C. (2016). Investigation of the antibiotic resistance and biofilm-forming ability of *Staphylococcus aureus* from subclinical bovine mastitis cases. *Journal of Dairy Science*, 99(11), 8607–8613. <https://doi.org/10.3168/jds.2016-11310>
- Azad, I. (2022). *Molecular Docking in the Study of Ligand-Protein Recognition : An Overview*. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.106583>
- Bbih, H., & Marpoyan, P. (2021). Perbanyakan vegetatif tanaman mangis (*Garcinia Mangostana* L.) dengan teknik sambung pucuk dibalai benih induk 08(2), 27–35.
- Bhattacharya, M., & Horswill, A. R. (2024). The role of human extracellular matrix proteins in defining *Staphylococcus aureus* biofilm infections. *FEMS Microbiology Reviews*, 48(1). <https://doi.org/10.1093/femsre/fuae002>
- Bolz, S. N., Schake, P., Stitz, C., Schroeder, M., Naomi, S., Schake, P., Stitz, C., Schroeder, M., Schake, P., Stitz, C., & Schroeder, M. (2025). Expert Opinion on Drug Discovery The structural basis of drugs targeting protein – protein interactions uncovered with the protein – ligand interaction profiler PLIP the protein – ligand interaction profiler PLIP. *Expert Opinion on Drug Discovery*, 20(11), 1447–1462. <https://doi.org/10.1080/17460441.2025.2557599>
- Collaborators, A. R. (2022). *Articles Global burden of bacterial antimicrobial resistance in 2019 : a systematic analysis*. 399.
- Donadelli, M., Kizys, R., & Riedel, M. (2020). *Since January 2020 Elsevier has created a COVID-19 resource centre with free information in English and Mandarin on the novel coronavirus COVID- 19 . Dangerous infectious diseases : Bad news for Main Street , good news for Wall Street ? January*.
- Eberhardt, J., Santos-Martins, D., Tillack, A. F., & Forli, S. (2021). AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(8), 3891–3898. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00203>
- Felix, L., Mishra, B., Khader, R., Ganesan, N., & Mylonakis, E. (2022). *In Vitro and In Vivo Bactericidal and Antibio fi lm Ef fi cacy of Alpha Mangostin Against Staphylococcus aureus Persister Cells*. 12(July), 1–14. <https://doi.org/10.3389/fcimb.2022.898794>
- Ferreira, L. G., Santos, R. N., Oliva, G., & Andricopulo, A. D. (2015). *Molecular Docking and Structure-Based Drug Design Strategies*.

- Fitria, A., Widiyasi, D. E., & Airlangga, H. R. M. H. (2020). *Prevalensi Methicillin Resistant Staphylococcus Aureus (MRSA) Terhadap Infeksi Nosokomial Di Asia*. 0341.
- Forli, S., Huey, R., Pique, M. E., Sanner, M., Goodsell, D. S., & Arthur, J. (2016). *HHS Public Access*. 11(5), 905–919. <https://doi.org/10.1038/nprot.2016.051>.
- Foster, T. J. (2023). *Non-deacetylated poly- N -acetylglucosamine- hyperproducing Staphylococcus aureus undergoes immediate autoaggregation upon vortexing*. January. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2022.1101545>
- Garoy, E. Y., Gebreab, Y. B., Achila, O. O., Tekeste, D. G., Kesete, R., Ghirmay, R., Kiflay, R., & Tesfu, T. (2019). Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus (MRSA): Prevalence and Antimicrobial Sensitivity Pattern among Patients - A Multicenter Study in Asmara, Eritrea. *Canadian Journal of Infectious Diseases and Medical Microbiology*, 2019.
- Ghasemian, A., Peerayeh, S. N., Bakhshi, B., & Mirzaee, M. (2016). *Comparison of Biofilm Formation between Methicillin-Resistant and Methicillin-Susceptible Isolates of Staphylococcus aureus*. 20(July), 175–181. <https://doi.org/10.7508/ibj.2016.03.007>
- Górecka, H., Guźniczak, M., Buzalewicz, I., Ulatowska-Jarża, A., Korzekwa, K., & Kaczorowska, A. (2025). Alpha-Mangostin: A Review of Current Research on Its Potential as a Novel Antimicrobial and Anti-Biofilm Agent. *International Journal of Molecular Sciences*, 26(11), 1–22.
- Guo, H., Tong, Y., Cheng, J., Abbas, Z., Li, Z., Wang, J., Zhou, Y., Si, D., & Zhang, R. (2022). Biofilm and Small Colony Variants—An Update on Staphylococcus aureus Strategies toward Drug Resistance. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(3). <https://doi.org/10.3390/ijms23031241>
- Heo, L., Park, H., & Seok, C. (2013). *GalaxyRefine : protein structure refinement driven by side-chain repacking*. 41(June), 384–388.
- Hernández-Cuellar, E., Tsuchiya, K., Valle-Ríos, R., & Medina-Contreras, O. (2023). Differences in Biofilm Formation by Methicillin-Resistant and Methicillin-Susceptible Staphylococcus aureus Strains. *Diseases*, 11(4). <https://doi.org/10.3390/diseases11040160>
- Illahi, A. D. (2026). *Pendekatan Molecular Docking dalam Metode Penemuan Obat Berbasis Struktur : Sebuah Tinjauan*. 8(June), 110–127.
- Kalipuro, K. (2019). *Isolasi dan Identifikasi Staphylococcus aureus pada Susu Kambing Peranakan Etawah Penderita Mastitis Subklinis di*. 2(2), 76–82. <https://doi.org/10.20473/jmv.vol2.iss2.2019.76-82>
- Khaleghian, M., Sahrayi, H., Hafezi, Y., Mirshafeeyan, M., Moghaddam, Z. S., Farasati Far, B., Noorbazargan, H., Mirzaie, A., & Ren, Q. (2023). In silico design and mechanistic study of niosome-encapsulated curcumin against multidrug-resistant Staphylococcus aureus biofilms. *Frontiers in Microbiology*, 14(November), 1–17.
- Kim, J., Kwon, J., Kim, M., Do, J., Lee, D., & Han, H. (2016). Low-dielectric-

- constant polyimide aerogel composite films with low water uptake. *Polymer Journal*, 48(7), 829–834. <https://doi.org/10.1038/pj.2016.37>
- Kot, B., Sytykiewicz, H., & Sprawka, I. (2018). Expression of the biofilm-associated genes in methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* in biofilm and planktonic conditions. *International Journal of Molecular Sciences*, 19(11). <https://doi.org/10.3390/ijms19113487>
- Kurniawan, K., Marfu'ah, N., & Fazriah D., G. (2025). In Silico Study of Gamma-Mangostin Compound from *Garcinia Mangostana* L. Fruit Skin and Activity Test as an Alpha Amylase Inhibitor. *Journal La Medihealtico*, 6(2), 395–410. <https://doi.org/10.37899/journallamedihealtico.v6i2.1889>
- Kusuma, M. D., & Jember, P. N. (2025). Uji Macam Kandungan dan Total Kadar Asam Amino Berbahan Ikan Lemuru (*Sardinella longiceps*). 2(1), 61–82.
- Lee, G. R., Won, J., Heo, L., & Seok, C. (2019). GalaxyRefine2: simultaneous refinement of inaccurate local regions and overall protein structure. 47(April), 451–455. <https://doi.org/10.1093/nar/gkz288>
- Mahmudah, R. (2021). Molecular docking studies of α - mangostin , γ - mangostin , and xanthone on peroxisome proliferator-activated receptor gamma diphenyl peptidase - 4 enzyme , and aldose reductase enzyme as an antidiabetic drug candidate. 196–208. <https://doi.org/10.4103/japtr.JAPTR>
- Mandiri, J. S., & Mierza, V. (2025). Article Riview : Potensi Senyawa Xanthone Dalam Ekstrak Kulit Manggis (*Garcinia Mangostana* L .) Sebagai Senyawa Aktif Obat. 20(2), 332–343.
- Mardianingrum, R., Roesman, K., Susanti, S., Nuraisah, A., Farmasi, P., Bakti, S., Husada, T., Cilolohan, J., & Kota, N. (2021). Studi In Silico Senyawa 1 , 4 - Naphthalenedione- 2 -Ethyl- 3 -Hydroxy sebagai Antiinflamasi dan Antikanker Payudara Preparasi Ligan dan Protein. 17(1), 83–95.
- McCarthy, H., Rudkin, J. K., Black, N. S., Gallagher, L., O'Neill, E., & O'Gara, J. P. (2015). Methicillin resistance and the biofilm phenotype in *staphylococcus aureus*. *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology*, 5(January), 1–9. <https://doi.org/10.3389/fcimb.2015.00001>
- Meah, M. S., Panichayupakaranant, P., Sayeed, M. A., & Kim, M. G. (2025). Isolation and Pharmacochemistry of α -Mangostin as a Chemotherapeutic Agent. *Pharmacognosy Magazine*, 21(1), 27–43.
- Mohd, W., Ahmad-hashim, F. H., Nabihah, S., & Jaafar, S. (2019). Valorization of mangosteen , “ The Queen of Fruits ,” and new advances in postharvest and in food and engineering applications: A review. *Journal of Advanced Research*, 20, 61–70. <https://doi.org/10.1016/j.jare.2019.05.005>
- Musini, A., Singh, H. N., Vulise, J., Pammi, S. S. S., & Archana Giri. (2024). Quercetin's antibiofilm effectiveness against drug resistant *Staphylococcus aureus* and its validation by in silico modeling. *Research in Microbiology*, 175(3), 104091. <https://doi.org/10.1016/j.resmic.2023.104091>
- Naufa, F., Mutiah, R., Yen, Y., & Indrawijaya, A. (2022). Studi in Silico Potensi

- Senyawa Katekin Teh Hijau (Camellia sinensis) sebagai Antivirus SARS CoV-2 terhadap Spike Glycoprotein (6LZG) dan Main Protease (5R7Y). 10(1), 584–596.*
- Nguyen, H. T. T., Nguyen, T. H., & Otto, M. (2020). The staphylococcal exopolysaccharide PIA – Biosynthesis and role in biofilm formation , colonization , and infection. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 18, 3324–3334. <https://doi.org/10.1016/j.csbj.2020.10.027>
- Nguyen, P. T. M., Nguyen, M. T. H., & Bolhuis, A. (2021). Inhibition of biofilm formation by alpha-mangostin loaded nanoparticles against Staphylococcus aureus. *Saudi Journal of Biological Sciences*, 28(3), 1615–1621. <https://doi.org/10.1016/j.sjbs.2020.11.061>
- Nidyardi, S. R., Akmal, H., & Ariyanti, N. S. (2018). Morphological and Anatomical Characterization of Mangosteen Plants and Its Relatives (Garcinia spp.) in Mekarsari Fruit Garden. *Jurnal Sumberdaya Hayati*, 4(1), 12–20. <http://biologi.ipb.ac.id/jurnal/index.php/jsdhyati>
- Nurdianti, L., Hidayat, T., & Bastian, R. (2022). *Formulasi dan Evaluasi Sediaan Suppositoria Ekstrak Etanol Kulit Buah Manggis (Garcinia mangostana L .). 2, 113–122.*
- Paggi, J. M., Pandit, A., & Dror, R. O. (2024). *The Art and Science of Molecular Docking*. 389–410.
- Paper, F. (2024). *A spotlight on gamma-mangostin : exploring its potential as antiviral agents*. 6(September 2023), 62–71.
- Paraskevopoulou, M. D., Vlachos, I. S., Karagkouni, D., Georgakilas, G., Kanellos, I., Vergoulis, T., Zagganas, K., Tsanakas, P., Floros, E., Dalamagas, T., & Hatzigeorgiou, G. (2016). *DIANA-LncBase v2 : indexing microRNA targets on non-coding transcripts*. 44(November 2015), 231–238.
- Peng, Q., Tang, X., Dong, W., Sun, N., & Yuan, W. (2023). A Review of Biofilm Formation of Staphylococcus aureus and Its Regulation Mechanism. *Antibiotics*, 12(1), 1–21. <https://doi.org/10.3390/antibiotics12010012>
- Pinzi, L., & Rastelli, G. (2019). *Molecular Docking : Shifting Paradigms in Drug Discovery*.
- Pratama, R. R., Putri, I. A., Fajarwati, J. I., Puji, D., Fauzi, M., Farmasi, F., Islam, U., Muhammad, K., Albanjari, A., Rahmadi, R., Universitas, P., Kalimantan, I., Arsyad, M., Banjari, A., No, A., Miai, S., Utara, K. B., Banjarmasin, K., & Selatan, K. (2025). *Reseptor estrogen alfa sebagai terapi kanker payudara secara molekuler docking the potential of bioactive compounds from phaleria macrocarpa on alpha estrogen receptors as a breast cancer therapy throuht molekuler dockings*5(1), 85–96.
- Purnama, P., Mansyar, S., Nuryastuti, T., & Anggraini, D. (2025). *Multi Drug Resistant dan Penggunaan Alat Medis Invasif dengan Pembentukan Biofilm Staphylococcus aureus di Riau Highlight : 7(3).*
- Putra, B. (2021). *Pemanfaatan Kulit Manggis Menjadi Minuman Tradisional di*

- Desa Buat Kabupaten Bungo*. 5(1), 60–64.
- Rizki, T., Yasni, S., Muhandri, T., & Yuliani, S. (2023). *Sintesis Nanoemulsi dari Ekstrak Kulit Manggis dengan Metode Energi Tinggi [Synthesis of Nanoemulsion from Mangosteen Rind Extract by High-Energy Method]*. 34(1), 109–118.
- Ronneberger, O., Tunyasuvunakool, K., Bates, R., Židek, A., Ballard, A. J., Cowie, A., Romera-paredes, B., Nikolov, S., Jain, R., Adler, J., Back, T., Petersen, S., Reiman, D., Clancy, E., Zielinski, M., Steinegger, M., Pacholska, M., Berghammer, T., Bodenstein, S., ... Kavukcuoglu, K. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596(May). <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>
- Sedov, I. A., & Zuev, Y. F. (2025). *Protein – Ligand Interactions : Recent Advances in Biophysics , Biochemistry , and Bioinformatics*. 1–5.
- Serhan, M., Sprowls, M., Jackemeyer, D., Long, M., Perez, I. D., Maret, W., Tao, N., & Forzani, E. (2019). Total iron measurement in human serum with a smartphone. *AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings, 2019-Novem*. <https://doi.org/10.1039/x0xx00000x>
- Shang, D., Liu, Y., Jiang, F., Ji, F., Wang, H., & Han, X. (2019). Synergistic Antibacterial Activity of Designed Trp-Containing Antibacterial Peptides in Combination With Antibiotics Against Multidrug-Resistant *Staphylococcus epidermidis*. *Frontiers in Microbiology*, 10(November), 1–15. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2019.02719>
- Shari, A., & Humaira, A. P. (2025). *IDENTIFIKASI BAKTERI STAPHYLOCOCCUS AUREUS PADA*. 5(4), 718–728.
- Sharma, S., Mohler, J., Mahajan, S. D., Schwartz, S. A., Bruggemann, L., & Aalinkeel, R. (2023). *Microbial Biofilm : A Review on Formation , Infection , Antibiotic Resistance , Control Measures , and Innovative Treatment*. 1–33.
- Sholikhati, A., Putri Rahmawati, R., & Dwi Kurnia, S. (2022). *Analisis Mutu Fisik Granul Ekstrak Kulit Manggis Dengan Metode Granulasi Basah*. 7(1), 1–9.
- Skariyachan, S., Gopal, D., Chakrabarti, S., Kempanna, P., Uttarkar, A., Muddebihalkar, A. G., & Niranjan, V. (2020). Structural and molecular basis of the interaction mechanism of selected drugs towards multiple targets of SARS-CoV-2 by molecular docking and dynamic simulation studies-deciphering the scope of repurposed drugs. *Computers in Biology and Medicine*, 126(October), 104054.
- Thi, N., Phuong, M., Quang, N. Van, Mai, T. T., Anh, N. V., Kuhakarn, C., & Reutrakul, V. (2017). Asian Pacific Journal of Tropical Medicine. *Asian Pacific Journal of Tropical Medicine*, 10(12), 1154–1160. <https://doi.org/10.1016/j.apjtm.2017.10.022>
- Tong, S. Y. C., Davis, J. S., Eichenberger, E., Holland, T. L., & Fowler, V. G. (2015). *Staphylococcus aureus Infections : Epidemiology , Pathophysiology , Clinical Manifestations , and Management*. 623.

- Touaitia, R., Mairi, A., Ibrahim, N. A., Basher, N. S., Idres, T., & Touati, A. (2025). *Staphylococcus aureus*: A Review of the Pathogenesis and Virulence Mechanisms. *Antibiotics*, 14(5), 1–37.
- Uruén, C., Chopo-Escuin, G., Tommassen, J., Mainar-Jaime, R. C., & Arenas, J. (2021). Biofilms as promoters of bacterial antibiotic resistance and tolerance. *Antibiotics*, 10(1), 1–36. <https://doi.org/10.3390/antibiotics10010003>
- Varadi, M., Anyango, S., Deshpande, M., Nair, S., Natassia, C., Yordanova, G., Yuan, D., Stroe, O., Wood, G., Green, T., Tunyasuvunakool, K., Petersen, S., Laydon, A., Augustin, Z., Jumper, J., Clancy, E., Green, R., Vora, A., Lutfi, M., ... Velankar, S. (2022). *NAR Breakthrough Article AlphaFold Protein Structure Database : massively expanding the structural coverage of protein-sequence space with high-accuracy models*. 50(November 2021), 439–444.
- WHO. (2022). *Global Antimicrobial Resistance and Use Surveillance System (GLASS) Report 2022*.
- Williams, C. J., Headd, J. J., Moriarty, N. W., Prisant, M. G., Videau, L. L., Deis, L. N., Verma, V., Keedy, D. A., Hintze, B. J., Chen, V. B., Jain, S., Lewis, S. M., Iii, W. B. A., Snoeyink, J., Adams, P. D., Lovell, S. C., Richardson, J. S., & Richardson, D. C. (2017). *MolProbity : More and better reference data for improved all-atom structure validation*. 27, 293–315.
- Wong, F., Krishnan, A., Zheng, E. J., Stärk, H., Manson, A. L., Earl, A. M., Jaakkola, T., & Collins, J. J. (2022). Benchmarking AlphaFold -enabled molecular docking predictions for antibiotic discovery . *Molecular Systems Biology*, 18(9), 1–20. <https://doi.org/10.15252/msb.202211081>
- Wu, X., Wang, H., Xiong, J., Yang, G. X., Hu, J. F., Zhu, Q., & Chen, Z. (2024). *Staphylococcus aureus* biofilm: Formulation, regulatory, and emerging natural products-derived therapeutics. *Biofilm*, 7(January), 100175.
- Zia, M., Dewanto, M., Afzal, F. R., Mumtaza, F. A., Tsaabitah, A. S., Melindra, Z. A., Rayyani, N., & Zahra, A. (2026). *Studi molekuler docking ligan derivatif thiazole terhadap enzim alpha amilase untuk manajemen diabetes melitus*. 3(6), 4455–4468.
- Zulfa, T., Dwi, A., 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 A Study Of The Molecular Docking of Chemical Compounds From The Mimosa Herb (Mimosa pudica) on The α -Glucos*. 3(4).