

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Escherichia coli (E. coli) merupakan bakteri yang hidup di usus manusia dan hewan khususnya dalam saluran pencernaan. Pada umumnya, jika kita mendengar kata bakteri yang langsung terlintas di otak kita adalah makhluk yang amat kecil dan sangat berbahaya karena menyebabkan berbagai penyakit. Apabila bakteri ini menjalar ke sistem atau organ tubuh lainnya, maka akan menyebabkan infeksi. Jika bakteri E. coli sampai masuk ke saluran kemih maka akan mengakibatkan infeksi pada saluran kemih. Selain di usus besar bakteri ini banyak terdapat di alam. E.coli dapat tumbuh berlebih apabila seseorang mengkonsumsi makanan yang sudah terkontaminasi dengan bakteri tersebut seperti susu, makanan yang tidak diolah sempurna. Bakteri ini dapat bersifat patogen apabila terdapat banyak sekali didalam tubuh manusia, sehingga menyebabkan penyakit seperti diare (Dion, 2020). E.coli dapat tumbuh pada suhu tinggi maupun rendah, dengan suhu rendah 7°C dan suhu tinggi hingga 44°C. Namun bakteri E.coli tumbuh optimal pada suhu antara 35-37°C dengan pH 7 – 7,5. Hidup dilingkungan lembab dan akan mati saat terjadinya proses pemanasan makanan, sehingga memasak makanan hingga matang dan menjaga kebersihan merupakan upaya pencegahan dampak buruk dari bakteri E. coli (Sutiknowati, 2016).

Salah satu cara untuk mengatasi infeksi dari bakteri E.coli adalah menggunakan antibiotik. Menurut Jufri (2018) menyatakan bahwa antibiotik adalah substansi yang diproduksi oleh mikroorganisme sebagai metabolit

sekunder dan dalam konsentrasi rendah dapat menghambat pertumbuhan atau membunuh organisme lain. Jadi, antibiotik adalah bahan antimikroba yang dihasilkan oleh organisme hidup.

Dalam penelitian-penelitian sebelumnya banyak menggunakan senyawa yang menghasilkan antimikroba, salah satunya yaitu senyawa 8-hidroksiquinolin. Hadirnya aktivitas antimikroba karena kemampuan senyawa 8-hidroksiquinolin untuk mengkelat dengan ion logam. Dimana, senyawa organik 8-hidroksiquinolin ini memiliki atom donor elektron yaitu O pada gugus OH dan N pada rantai sikliknya. Adanya donor elektron dari ligan memungkinkan terjadinya ikatan dengan atom pusat untuk membentuk kompleks.

Logam Besi (Fe) dengan nomor atom 26, logam Tembaga (Cu) dengan nomor 29, logam Kobalt (Co) dengan nomor atom 27, logam Nikel (Ni) dengan nomor atom 28, dan logam Zink (Zn) dengan nomor atom 30. Logam-logam tersebut termasuk dalam golongan transisi yang memiliki orbital d yang kosong, hal ini memungkinkan dapat terjadinya transisi elektron jika logam tersebut dikonjugasikan dengan 8HQ.

Menurut hasil penelitian (Cipurkovic et al. 2021) menyatakan bahwa aktivitas antimikroba kompleks, dengan zona penghambatan dalam kisaran 15-28 mm, senyawa 8-hidroksiquinolin terbukti memiliki kemampuan yang jauh lebih tinggi untuk menghambat pertumbuhan mikroorganisme yang diuji. Logam Fe, Cu, Co, Ni, Zn dapat membentuk kompleks dengan 8-hidroksiquinolin untuk mengetahui aktivitas antimikroba sebelum dilakukan penelitian eksperimen di laboratorium, yaitu dengan menggunakan pendekatan *Quantitative Structure Activity*

Relationship (QSAR) atau *Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas* (HKSA). Metode QSAR atau HKSA cukup terbukti untuk memprediksi struktur senyawa dengan aktivitas baru berdasarkan struktur dasar yang diketahui aktivitasnya secara eksperimen (Sudiono, 2004).

Proses mendesain obat baru merupakan proses yang terbilang sangat panjang dan cukup kompleks. Sehingga menjadi tantangan bagi peneliti untuk menghasilkan strategi, upaya yang efektif dan ekonomis untuk penemuan obat baru. Salah satu strategi yang banyak dikembangkan untuk mendesain molekul obat baru, yaitu dengan pemanfaatan metode kimia komputasi (Isnaeni, 2015). Metode kimia komputasi yang populer untuk mendesain obat adalah *Quantitative Structure Activity Relationship* (QSAR) atau *Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas* (HKSA) karena dengan metode ini struktur senyawa baru bisa dikembangkan dengan aktivitas baru yang dapat diprediksi melalui perhitungan secara komputasi (Muliadi, 2021).

Dalam penelitian ini, dikaji senyawa kompleks 8-hidroksiquinolin dengan logam Fe, Cu, Co, Ni, Zn sebagai bahan kajian untuk mengetahui aktivitas antimikroba dan untuk memperoleh persamaan QSAR/HKSA. Menggunakan deskriptor elektronik, deskriptor hidrofobik, dan deskriptor sterik untuk menentukan persamaan HKSA, yang digunakan untuk meramalkan aktivitas antimikroba dari senyawa baru hasil modifikasi. Perhitungan yang dilakukan menggunakan metode DFT dengan basis set 6-31G untuk memperoleh persamaan HKSA digunakan analisis korelasi dan analisis regresi multilinear.

Berdasarkan uraian latar belakang diatas, maka telah dilakukan penelitian dengan judul **Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Antimikroba Escherichia Coli menggunakan Kompleks Fe, Cu, Co, Ni, Zn dengan 8-Hidroksiquinolin.**

B. Identifikasi Masalah

Berdasarkan uraian latar belakang dapat diidentifikasi permasalahan-permasalahan sebagai berikut :

1. Kajian dan pemodelan senyawa 8-hidroksiquinolin melalui pendekatan komputasi.
2. Penentuan deskriptor melalui perhitungan dilakukan secara komputasi untuk mendapatkan persamaan QSAR/HKSA dalam memprediksi aktivitas Antimikroba senyawa 8-hidroksiquinolin.

C. Batasan Masalah

Berdasarkan uraian identifikasi masalah diatas, maka penelitian ini perlu dibatasi pada mikroba *Escherichia Coli* dan senyawa 8-hidroksiquinolin.

D. Rumusan Masalah

Rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Bagaimana memodelkan struktur senyawa 8-hidroksiquinolin dengan Fe, Cu, Co, Ni, Zn menggunakan metode DFT ?
2. Bagaimana aktivitas antimikroba senyawa 8-hidroksiquinolin dengan Fe, Cu, Co, Ni, Zn pada bakteri *Escherichia Coli* menggunakan metode QSAR/HKSA?

E. Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan sebagai berikut :

1. Untuk mengetahui pemodelan struktur senyawa 8-hidroksiquinolin dengan Fe, Cu, Co, Ni, Zn menggunakan metode DFT.
2. Untuk mengetahui aktivitas antimikroba senyawa 8-hidroksiquinolin dengan Fe, Cu, Co, Ni, Zn pada bakteri *Escherichia Coli* menggunakan metode QSAR/HKSA.

F. Manfaat Penelitian

Adapun manfaat yang didapat dari penelitian ini diuraikan sebagai berikut:

1. Bagi peneliti, untuk menambah wawasan pengetahuan dalam bidang ilmu kimia.
2. Bidang pendidikan, bisa digunakan sebagai modul praktikum pada matakuliah kimia komputasi untuk pemodelan struktur dan memprediksi aktivitas dari senyawa kompleks turunan 8-hidroksiquinolin menggunakan metode HKSA.