

Bidang Fokus Penelitian: Sains dan Teknologi

**LAPORAN AKHIR
PENELITIAN KEBIJAKAN FAKULTAS**



**ANTIMICROBIAL FOOD PACKAGING BERBAHAN DASAR MATERIAL ALAM
LOKAL SEBAGAI UPAYA PENCEGAHAN PENYEBARAN COVID-19**

TIM PENGUSUL:

Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc
Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si
Dr. Amaria, M.Si
Mirwa Adiprahara A., S.Si., M.Si

NIDN 0006068204
NIDN 0004126505
NIDN 0029066401
NIDN 0021048603

**UNIVERSITAS NEGERI SURABAYA
NOVEMBER 2020**

**HALAMAN PENGESAHAN
PENELITIAN KEBIJAKAN FAKULTAS**

Judul Penelitian : Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19

Kode>Nama Rumpun Ilmu : 112 / Kimia

Bidang Fokus Penelitian : Material Maju

Ketua Peneliti

a. Nama Lengkap : Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc

b. NIDN : 0006068204

c. Jabatan Fungsional : Lektor Kepala

d. Program Studi : Kimia

e. Nomor HP : 08174140131

f. Alamat surel (e-mail) : dinakartika@unesa.ac.id

Anggota Peneliti (1)

a. Nama Lengkap : Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si

b. NIDN : 0004126505

c. Perguruan Tinggi : Universitas Negeri Surabaya

Anggota Peneliti (2)

a. Nama Lengkap : Dr. Amaria, M.Si

b. NIDN : 0029066401

c. Perguruan Tinggi : Universitas Negeri Surabaya

Anggota Peneliti (ke 3)

- Nama Lengkap : Mirwa Adiprahara Anggarani, S.Si., M.Si
- NIDN : 0021048603
- Perguruan Tinggi : Universitas Negeri Surabaya
- Institusi Mitra

a. Nama Institusi Mitra : -

b. Alamat : -

c. Penanggung Jawab : -

Lama Penelitian Keseluruhan : 1 tahun

Usulan Penelitian Tahun ke- : 1

Biaya Penelitian Keseluruhan : Rp 12.000.000

Biaya Penelitian : -

- diusulkan ke LPPM UNESA : Rp 12.000.000

- dana institusi mitra : Rp - / *in kind* tuliskan: -(jika ada)

Surabaya, 20-11-2020

Ketua Peneliti,



(Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc)
NIP 198206062005012003

Mengetahui,
Dekan Fakultas MIPA

(Prof. Dr. Madlazim, M.Si)
NIP 196511051991031012

Menyetujui,
Ketua LPPM

Prof. Dr. Darni, M.Hum.
NIP. 196509261990022001

*) Sesuai dengan skema penelitian yang dipilih

RINGKASAN

Kemasan makanan (*food packaging*) fungsional adalah inovasi yang diperlukan untuk mengakomodasi berbagai kebutuhan konsumsi produk pangan bagi masyarakat dunia. *Antimicrobial food packaging* telah menjadi solusi untuk dikembangkan agar kepercayaan konsumen terhadap produk pangan semakin tinggi. Ditambah lagi dengan adanya wabah pandemic covid-19 yang melanda seluruh Negara di dunia menyebabkan, *antimicrobial food packaging* yang mudah didapat, murah dan memiliki kemampuan untuk mencegah penyebaran, kuman, bakteri, atau virus penyakit penting untuk dilakukan penelitian. Pengembangan material aktif dalam *food packaging* sangat bervariasi tergantung fungsionalitas yang akan ditawarkan, serta bahan baku yang bersifat alami. Penggunaan material berbasis bahan alam pada food packaging dapat menambah inovasi dan kepraktisan *food packaging*. Material alam kitosan menjadi sumber utama yang dikembangkan pada teknologi *food packaging*, sebab ketersediaan bahannya yang sangat melimpah di Indonesia. Kitosan merupakan biopolymer alam yang diisolasi dari limbah hewan jenis Crustacea, yang banyak tersedia melimpah di Indonesia yang merupakan negara maritime. Dalam proses aplikasinya sebagai food packaging, kitosan digabungkan dengan material polimer lain baik anorganik maupun organik untuk membentuk biokomposit dengan tujuan meningkatkan sifat fungsionalnya. Material anorganik zeolite dapat berfungsi sebagai nanofiller dalam pembuatan food packaging berbasis kitosan. Zeolit yang merupakan geopolimer alam dengan struktur SiO_2 dan Al_2O_3 meningkatkan sifat kekuatan mekanik food packaging serta meningkatkan sifat *adsorbing* dan *rejecting* material. juga memberikan sifat fungsional antimicrobial yang tinggi. Sifat fungsional food packaging yang akan dikembangkan pada penelitian ini adalah antibakteri. Hal ini dilakukan agar produk pangan memiliki umur simpan yang lebih panjang dan menghindari kontaminasi monomer plastik sintetik serta terhindar dari kontaminasi bakteri, virus dan kuman penyakit. Food packaging dikembangkan pada penelitian ini adalah material biokomposit berbahan dasar kitosan, zeolite dan ZnO. ZnO merupakan material oksida logam dengan luas permukaan yang tinggi, struktur kristalin serta memiliki sifat antimicrobial untuk menghambat berbagai jenis microba seperti bakteri, virus dan jamur.

Pada penelitian ini akan dilakukan sintesis antimicrobial food packaging dari biokomposit berbahan dasar material alam local kitosan dan zeolite yang didoping dengan Zn sebagai salah satu alternative penyediaan food packaging yang murah dan efektif serta bersifat antimicrobial untuk membantu mencegah penyebaran wabah covid-19. Antimicrobial food packaging disintesis dengan metode sol-gel dan dipreparasi dengan metode casting untuk membentuk film tipis

transparan. Uji karakteristik food packaging yang dilakukan meliputi uji kekuatan mekanik dan uji antibakteri. Luaran yang ditargetkan pada penelitian ini adalah artikel ilmiah dari partisipasi sebagai pemakalah pada seminar internasional. Tingkat kesiapan teknologi (TKT) pada penelitian ini adalah pada level TKT 4, dimana telah dilakukan uji coba sintesis material biokomposit pada skala laboratorium.

Hasil yang telah didapatkan yaitu uji in silico komposit kitosan-zeolit-ZnO dengan software analisis molecular docking. Hasil uji in silico menunjukkan komposit kitosan-zeolit-ZnO memiliki potensi sebagai agen anti SARS Cov 2. Komposit kitosan-zeolit-ZnO juga telah berhasil disintesis pada skala lab. Hasil uji morfologi komposit kitosan-zeolit-ZnO menunjukkan bahwa telah terbentuk campuran yang homogen dengan distribusi ZnO yang cukup baik pada substrat kitosan zeolit. Berdasarkan data hasil uji antibakteri komposit kitosan-zeolit-ZnO terhadap bakteri E. Coli menunjukkan bahwa komposit kitosan-zeolit-ZnO memiliki aktivitas penghambatan bakteri yang cukup baik dimana komposit kitosan-zeolit-ZnO dengan komposisi diatas 1% memiliki aktivitas penghambatan yang lebih besar.

PRAKATA

Puji syukur penulis panjatkan kehadiran Allah SWT, atas segala limpahan rahmat dan karunia-nya sehingga penulis dapat menyelesaikan laporan penelitian Kebijakan Fakultas yang berjudul “Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19”.

Penelitian ini memperoleh dana dari DIPA Unesa melalui program Penelitian Kebijakan Tahun Anggaran 2020. Penelitian yang telah dilakukan yaitu preparasi prekursor nanokomposit yaitu pembuatan larutan kitosan dan pembuatan zeolite-ZnO, pembuatan packaging nanokomposit kitosan-zeolit-ZnO, karakterisasi packaging serta uji aktivitas antibakteri packaging. Untuk itu, kami mengucapkan terima kasih kepada pihak-pihak yang telah membantu kelancaran dan kesuksesan pelaksanaan tahapan penelitian sampai saat ini yaitu Rektor Unesa, Ketua Lembaga Penelitian Unesa, Dekan FMIPA Unesa, Kepala Laboratorium Kimia Unesa, Kepala Sub Laboratorium Kimia Anorganik, Kimia Organik, Kimia Dasar, Kimia Analitik, Kimia Instrumen, Kimia Fisik Unesa, Pimpinan dan Staf Jurusan Kimia Unesa, para Laboran dan mahasiswa kimia Unesa yang telah membantu peneliti, sehingga terlaksana penelitian ini.

Akhirnya, kami ucapkan terimakasih atas kesempatan yang diberikan kepada penulis. Saran dan masukan dalam penyelesaian penelitian ini sangat berarti bagi kesempurnaan penelitian ini.

Surabaya, November 2020

Penulis

DAFTAR ISI

Halaman Sampul.....	i
Halaman Pengesahan.....	ii
Ringkasan.....	iii
Prakata.....	v
Daftar Isi.....	vi
Daftar Gambar.....	vii
Daftar Tabel.....	viii
Daftar Lampiran.....	ix
Bab 1 Pendahuluan.....	1
1.1.Latar Belakang.....	1
1.2. Rumusan Masalah.....	2
Bab 2 Tinjauan Pustaka.....	3
Bab 3 Tujuan dan Manfaat Penelitian.....	7
Bab 4 Metode Penelitian.....	8
Bab 5 Hasil Yang Dicapai.....	11
Bab 6 Kesimpulan dan Saran.....	19
Daftar Pustaka.....	20
Lampiran.....	21

DAFTAR GAMBAR

Gambar 4.1 Diagram Alir Penelitian.....	10
Gambar 5.1 Struktur SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein.....	11
Gambar 5.2 Visualisasi ligan kitosan didocking dengan SARS CoV-2.....	13
Gambar 5.3 Visualisasi ligan kitosan dalam asam didocking dengan SARS CoV-2.....	13
Gambar 5.4 Visualisasi ligan zeolit didocking dengan SARS CoV-2.....	13
Gambar 5.5 Visualisasi ligan ZnO didocking dengan SARS CoV-2.....	13
Gambar 5.6 Preparasi material packaging kitosan-zeolit-ZnO.....	14
Gambar 5.7 Lapis tipis material packaging kitosan-zeolit-ZnO.....	15
Gambar 5.8 Morfologi permukaan material packaging.....	16
Gambar 5.9 Foto Zona Penghambatan Bakteri <i>E. Coli</i> oleh Komposit Kitosan-Zeolit-ZnO	18

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Roadmap Penelitian.....	6
Tabel 4.2. Tahapan Luaran Indikator Capaian Penelitian.....	9
Tabel 4.3. Tugas Tim Peneliti Sesuai Tahapan Penelitian.....	10
Tabel 5.1. Data Energi Ikat dan Konstanta Inhibitor SARS CoV-2 Receptor	12
Tabel 5.2 Diameter Daerah Penghambatan Bakteri (<i>Clear Zone Inhibition</i>) Komposit Kitosan –zeolit-ZnO Terhadap Pertumbuhan Bakteri <i>E. Coli</i>	17

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Dokumentasi Kegiatan Penelitian.....	22
Lampiran 2. Publikasi Artikel Ilmiah.....	23

BAB I PENDAHULUAN

Baru-baru ini, biomaterial sedang marak dikembangkan untuk mengurangi ketergantungan pada bahan bakar fosil [1,2]. Industri kemasan makanan atau food packaging umumnya juga melirik komponen biopolimer komposit berbahan dasar alam sebagai bahan baku yang bersifat aman dan ramah lingkungan [3–5]. Antimicrobial food packaging telah menarik banyak perhatian industri makanan karena peningkatan permintaan konsumen terhadap ketersediaan makanan olahan dan aman yang bebas dari bahan pengawet sintetis. Antimicrobial food packaging merupakan suatu teknik pengemasan dengan modifikasi atmosfer kemasan atau bahan pengemas yang mengandung agen antimikroba seperti antimikroba alami, bahan nano, dll., yang digunakan untuk mengendalikan pertumbuhan dan mengurangi aktivitas mikroba.

Dalam kurun waktu satu dekade terakhir, berbagai upaya telah dilakukan untuk mengembangkan biokomposit antimicrobial food packaging berbasis material alam untuk meningkatkan umur simpan dan kualitas antimikroba yang baik. Kitosan merupakan salah satu biopolimer yang menjanjikan sebagai bahan dasar untuk aplikasi antimicrobial food packaging di industri makanan dengan sifat biodegradable, tidak beracun dan biokompatibel, serta biaya lebih rendah dan ketersediaan berlimpah di alam. Penggabungan antara kitosan dengan biopolimer lain seperti polisakarida atau protein atau nanofiller anorganik, dilakukan untuk meningkatkan sifat fungsional dan antimikroba untuk penerapan sebagai makanan bahan kemasan. Komposit kitosan dengan bahan polimer alam atau bahan anorganik nanopartikel seperti zeolite, ZnO, TiO₂ sebagai *antimicrobial food packaging* secara signifikan banyak dikembangkan dalam beberapa tahun terakhir [6-7].

Pada penelitian ini mengembangkan material kitosan dan zeolit sebagai antimicrobial food packaging biokomposit. agen antibakteri pada biokomposit. Zeolit umumnya diaplikasikan sebagai katalis reaksi kimia, namun laporan penelitian terbaru menunjukkan potensi zeolit sebagai agen antibakteri. Kenyó et al., [8] melaporkan bahwa untuk meningkatkan sifat antibakteri zeolit harus dilakukan proses pertukaran ion yaitu ion perak (Ag⁺). Mihaly-kozmata et al., [9] melaporkan bahwa Ag-Zeolit menghambat pertumbuhan *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis*, dan *Staphylococcus aureus*. Sedangkan

Demirci et al., [10] melaporkan bahwa zeolit A dan X terimpregnasi ion perak, Cu dan Zn mampu menghambat pertumbuhan *E. coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, dan *S. aureus*. Bahkan Faujasit terdoping ion perak menunjukkan antibakteri dan jamur [11]. Aktivitas antibakteri zeolit (Ag-Zeolit dan Zeolit/Ag) yang tinggi menunjukkan potensi aplikasi dalam plastik biokomposit sebagai agen antibakteri.

Pada penelitian ini akan digunakan kitosan, zeolit alam dan oksida logam ZnO sebagai agen antibakteri dengan memodifikasi ukuran partikel pada zeolit menjadi nanopartikel untuk meningkatkan kekuatan mekanik food packaging serta penambahan ZnO untuk meningkatkan sifat antimikroba dari food packaging. Permasalahan yang diteliti pada penelitian ini yaitu bagaimana mengetahui karakteristik material antimicrobial food packaging yang disintesis pada skala laboratorium melalui tahapan uji antibakteri dan kekuatan mekanik. Tujuan khusus yang ingin dicapai adalah mendapatkan antimicrobial food packaging yang murah, ramah lingkungan dan efektif dalam rangka membantu pencegahan penyebaran wabah covid-19. Urgensi penelitian adalah ketersediaan food packaging yang bersifat antimicrobial dari bahan alam yang ramah lingkungan sebagai salah satu solusi untuk mengurangi kemasan plastic sintetis, peningkatan fungsional bio food packaging serta terwujudnya kesehatan masyarakat di tengah pandemic covid-19.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Active Food Packaging

Active food packaging atau kemasan makanan aktif memiliki karakter yang tidak seperti bahan kemasan makanan konvensional, sistem kemasan makanan aktif memiliki karakter inhibisi terhadap oksigen [12], mengadsorb kelembaban [13], penghasil CO₂ [14], peredam etilen [15], antimikroba [16] atau agen antijamur [17]. Ahmed et al., [18] melaporkan bahwa kemasan makanan aktif juga tergantung pada komponen fungsional yang terdapat dalam matriks, bahan pengemas dapat memiliki aktivitas intrinsiknya, seperti karakter antioksidan, antimikroba, dan antijamur pada makanan yang dikemas. Food packaging dapat disintesis dari biopolymer alam yang digabung dengan biopolymer lain atau protein maupun material polimer anorganik seperti clay, zeolite. Antimicrobial food packaging memiliki agen antimikroba yang terkandung dalam kemasan untuk menghambat tumbuhnya mikroba dan kontaminasi selama penyimpanan dan transportasi. Beberapa peneliti telah melaporkan beberapa agen antibakteri yang telah digabungkan dalam kemasan antara lain *essential oils*, polikation, kitosan dan perak [18] untuk meningkatkan keamanan makanan yang terdapat terhadap mikroba dan jamur. Akhir-akhir ini sedang marak dikembangkan material anorganik berpori digunakan sebagai *support nanofiller* antibakteri yang digabung dengan metal [17]. Salah satu material berpori yang sedang marak dikembangkan adalah zeolit.

2.2. Biopolimer untuk Food Packaging

Biopolimer adalah polimer yang terdiri dari unit monomer yang terikat secara kovalen, membentuk rantai seperti molekul. Awalan bio menunjukkan bahwa biopolimer dapat terurai secara hayati. Dengan demikian, biopolimer memiliki kemampuan untuk menjadi terdegradasi atau terurai melalui aksi organisme alami yang meninggalkan produk sampingan organik seperti CO₂ dan H₂O yang aman terhadap lingkungan. Biopolimer telah dianggap sebagai bahan alternatif menjadi plastik yang terbuat dari minyak bumi karena dapat terurai secara hayati, terbarukan, dan berlimpah [19].

Jenis biopolimer yang paling umum untuk aplikasi kemasan makanan adalah biopolimer alami misalnya pati, selulosa, kitosan, dan agar yang berasal dari karbohidrat serta gelatin, gluten, alginat, protein whey, dan kolagen yang berasal dari protein. Saat ini, kemajuan teknologi telah

menyebabkan pembentukan biopoloymer sintetis yang meliputi asam polilaktat (PLA), polycaprolactone (PCL), poliglikolat asam (PGA), polivinil alkohol (PVA), dan PBS suksinat polibutilena [20]. Keuntungan dari biopolimer sintetis mencakup potensi untuk menciptakan industri yang berkelanjutan serta peningkatan di berbagai bidang sifat-sifat seperti daya tahan, fleksibilitas, kilap tinggi, kejernihan, dan kekuatan tarik. biopolimer alami yang diekstraksi dari biomassa (mis. sumber daya agro), biopolimer sintetis dari produksi mikroba atau fermentasi (mis. polihidroksi-alkanoat (PHA)), biopolimer sintetis secara konvensional dan kimia disintesis dari biomassa (mis. PLA) dan biopolimer sintetis secara konvensional dan kimia disintesis dari produk minyak bumi (mis. PCL). Tiga kelompok pertama berasal dari sumber daya terbarukan sedangkan kelompok terakhir adalah berasal dari minyak bumi.

2.3. Nanofiller

Nanofiller dalam pembuatan food packaging menghasilkan bio-nanocomposites food packaging bergantung pada area permukaan yang tinggi pengisi nanosized yang menghasilkan area antarmuka atau batas yang besar antara matriks atau biopolimer dan nanofiller. Antarmuka yang besar memungkinkan modifikasi mobilitas molekul, selain itu perilaku relaksasi sifat mekanik, termal, dan penghalang bio-nanokomposit [21]. Terutama untuk makanan aplikasi kemasan, bahan bio-nanokomposit biasanya dirancang untuk memiliki kemampuan sifat mekanik dan termal selama pemrosesan makanan, transportasi, dan penyimpanan [20]. Banyak jenis pengisi nanosized (kurang dari 100 nm) telah digunakan untuk meningkatkan kinerja biopolimer. Nanofiller yang umumnya dipelajari untuk aplikasi kemasan makanan dapat diklasifikasikan menjadi beberapa jenis yang meliputi nanopartikel, nanofibril, nanorod, dan nanotube.

2.4. Kitosan

Kitosan dikenal sebagai polisakarida antibakteri karena memiliki gugus amina dan dapat membentuk polikationik dalam suasana asam. Sifat polikationik ini menyebabkan kitosan dapat berinteraksi dengan berbagai material bermuatan negatif salah satunya adalah dinding sel bakteri [22]. Keuntungan lain kitosan adalah jumlah kitosan yang sangat melimpah di alam, yang salah satunya dapat diperoleh dari limbah cangkang udang dan kepiting (*crustacean*) yang banyak dihasilkan dari sektor industri makanan.

Kitosan juga dikenal sebagai polimer alam yang *biocompatible*, *biodegradable*, non toksik dan digunakan secara luas dalam bidang farmasi, kedokteran, pengolahan makanan dan pembuatan kertas.

2.5. Zeolit

Zeolit terdiri dari silikon, aluminium, dan oksigen dalam *framework* dengan kation, air di dalam pori-pori, pada dasarnya adalah silikat alumina nanopori. Silika adalah tetrahedronin reguler yang netral di mana muatan positif ion silikon seimbang dengan oksigen. Namun terdapat muatan negatif yang tidak seimbang dalam struktur alumina. Oleh karena itu, struktur total zeolit memiliki muatan negatif, dan muatan ini diseimbangkan dengan kation (terutama oleh Na^+ atau K^+). Kation ini dapat ditukar dalam larutan dengan ion positif yang diinginkan seperti logam berat atau ion amonium [10]. Rumus umum zeolit ditunjukkan dalam persamaan sebagai $\text{M}_{x/n}[(\text{AlO}_2)_x(\text{SiO}_2)_y] \cdot z\text{H}_2\text{O}$ di mana M berarti kation [23]. Zeolit telah banyak digunakan dalam berbagai aplikasi tidak hanya sebagai katalis, hal ini dikarenakan zeolit memiliki karakter struktur yang baik, pengikatan reversibel dengan molekul kecil, selektivitas bentuk dan ukuran, dan kemampuan zeolit berperilaku seperti metaloenzim. Selain sifat-sifat tersebut zeolit juga tidak beraroma, tidak berbau, dan tidak berbahaya, karakteristik antimikroba dapat diperoleh melalui proses pertukaran ion. Ion yang paling umum digunakan dalam proses pertukaran adalah perak karena stabilitas dan spektrum luas dari efek antibakteri [24]. Telah dilaporkan bahwa perak yang digabungkan dengan zeolit ditemukan bersifat antibakteri terhadap *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* dan *Staphylococcus aureus* [25]. Beberapa peneliti yang telah mengembangkan zeolit sebagai agen antibakteri dalam film yaitu Demirci et al., [26], Shing et al., [27], Mihaly-Cozmata et al., [28], Kenyó et al., [8] and Youssef et al., [24]

2.6. ZnO

Nano partikel ZnO diketahui memiliki kemampuan sebagai bahan antibakteri yang efektif. Nano partikel ZnO yang memiliki nilai zeta potensial positif dapat menyerang membran sel bakteri seperti *E. Coli* (bakteri gram negatif) pada kontak langsung serta melepas ion Zn^{2+} yang dapat merusak mitokondria dan lisosom sel bakteri yang berujung pada kematian bakteri [29]. Perubahan pada ukuran partikel ZnO menjadi ukuran nano dapat meningkatkan kemampuan antibakterinya [30].

Tabel 2.1. Roadmap Penelitian

Tahun	2010	2011-2012	2013	2014-2015	2016-2017	2018-2019	2020-2021
Bahan Dasar	Kitosan dari limbah cangkang kepiting, TEOS dan TiCl_4	Kitosan dari limbah cangkang kepiting, TEOS dan ZnCl_2	Kitosan dari limbah cangkang kepiting, TEOS dan Al-iPr	Kitosan dari limbah cangkang kepiting, TEOS, Al-iPr dan ZnCl_2	Kitosan dari limbah cangkang kepiting, TEOS, Ti-iPr dan ZnCl_2	Kitosan dari limbah cangkang kepiting, Ti-iPr dan Al-iPr	Kitosan dan Zeolit alam, ZnO
Proses	Preparasi nano komposit kitosan- $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ titania	Preparasi nano komposit kitosan- ZnO/SiO_2	Preparasi nano komposit kitosan- $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$	Preparasi nano komposit kitosan- $\text{ZnO}-\text{Al}_2\text{O}_3$	Preparasi nano komposit kitosan- $\text{ZnO}-\text{TiO}_2$	Preparasi nano komposit kitosan- $\text{TiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$	Preparasi nanokomposit kitosan zeolite- ZnO
Teknologi	Sol-gel	Sol-gel	Sol-gel	Sol-gel	Sol-gel	Sol-gel	Sol-gel
Produk	Nano komposit kitosan- $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$	Nano Komposit Kitosan- ZnO/SiO_2	Nano Komposit Kitosan- $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$	Nano Komposit Kitosan- $\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$	Nano Komposit Kitosan- ZnO/TiO_2	Nano Komposit Kitosan- $\text{TiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$	Nano komposit kitosan-zeolit ZnO
Aplikasi/ Penerapan	Pelapis antibakteri pada tekstil	Agen antibakteri, anti UV pada tekstil	Agen Fiksasi zat warna pada tekstil	Agen Antibakteri pada kain katun	Agen UV blocking dan self cleaning pada tekstil	Agen anti UV dan Anti bakteri pada tekstil	Agen Antimicrobial pada food packaging
Penelitian	Pembuatan Agen Antibakteri Ramah Lingkungan dari Nano Komposit Kitosan Silika Titania	Pembuatan Nanokomposit kitosan- ZnO/SiO_2 sebagai Agen Antibakteri dan Agen Anti UV pada Tekstil	Pemanfaatan potensi alam kitosan-berpadu material nano $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$ sebagai agen fiksasi zat warna tekstil	Pembuatan dan Aplikasi nanokomposit kitosan- $\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ sebagai bahan antibakteri untuk pengembangan ecofriendly tekstil antibakteri	Pembuatan Material Nanokomposit Berbasis Biopolimer Kitosan dan Material Oksida ZnO/TiO_2 Sebagai Agen UV Blocking dan Self Cleaning Dalam Rangka Pengembangan Inovasi Tekstil Multifungsi	Pengembangan agen anti UV dan agen anti air pada tekstil dari nano komposit kitosan- $\text{TiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3$	Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19

BAB III

TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN

3.1. Tujuan

Tujuan Umum

Tujuan umum penelitian adalah pengembangan material maju berbasis polimer alam sebagai material active packaging yang efektif dan ramah lingkungan

Tujuan Khusus

- a. Mendapatkan data karakteristik fisika material antimicrobial packaging berbasis polimer alam
- b. Mendapatkan data karakteristik kimia material antimicrobial packaging berbasis polimer alam
- c. Mendapatkan data sifat antibakteri dan kekuatan mekanik material antimicrobial packaging berbasis polimer alam

3.2. Manfaat

- a. Dapat menunjang pengembangan material maju untuk aplikasi material active packaging yang efektif dan ramah lingkungan
- b. Dapat membantu pemeliharaan kesehatan masyarakat melalui bahan packaging yang bersifat antimicrobial

BAB IV

METODE PENELITIAN

Populasi penelitian ini adalah material antimicrobial food packaging berbasis kitosan, zeolit, ZnO yang disintesis dengan metode sol gel sedangkan sampel penelitian ini adalah sebagian dari material antimicrobial food packaging.

Lokasi Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Kimia Anorganik Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Surabaya

Instrumen Penelitian

a. Alat

Alat-alat yang digunakan dalam penelitian ini antara lain yaitu, Hot plate magnetic stirrer, Pengaduk magnet, Cawan porselen, Alat penggerus (mortar), Kaca arloji, Cawan petri, Penjepit stainless steel, Termometer air raksa, Neraca analitis, Oven, Ayakan 80 mesh (Retsch), Ultrasonicator, Furnace, *Fourier Transform Infra-Red Spectrophotometer* (FTIR), *Scanning Electron Microscopy* (SEM), *X-ray Diffraction* (XRD), Spektrofotometer FTIR, TGA-DTA, Spektrofotometer UV VIS dan tensile test.

b. Bahan

Bahan-bahan yang diperlukan dalam penelitian ini antara lain Kitosan, HCl p.a (Merck), CH₃COOH p.a (Merck), Etanol p.a (Merck), Etanol teknis, Ti-(OC₃H₇)₃ (sigma), PEG, PVA p.a (Merck), Znasetat (Merck), zeolit alam, kertas indikator pH, kaca preparat, Aquades, dan Aqua deionisasi.

Prosedur Penelitian

a. Tahap pembuatan Zn-Zeolit

Zn-Zeolit dibuat dari bahan Znasetat dan zeolit asam teraktivasi. Sebanyak 0,2249 mg Znasetat dilarutkan dalam campuran etanol air (50:50 %v/v) dan ditambah zeolit alam teraktivasi, ditambah NaOH kemudian direfluks suhu 85 oC waktu 1 jam.

b. Tahap pembuatan kitosan

Larutan kitosan dibuat dengan cara melarutkan 0,1 gram serbuk kitosan ke dalam larutan asam asetat 1M.

c. Preparasi food packaging

Larutan kitosan dan larutan PVA/PLA yang dibuat dengan menambahkan PLA ke 100 ml air terdeionisasi pada 70°C dan diaduk hingga larut sempurna. Kemudian variasi PVA/PLA: kitosan disiapkan dengan mencampur secara mekanis larutan kedua polimer dan disimpan di bawah pengadukan mekanis selama 4 jam. Setelah itu PEG sebanyak 5% terhadap PVA/PLA sebagai pemlastis ditambahkan. Campuran diaduk selama 1 jam. Kitosan/PVA/PLA yang telah disiapkan dicampur secara mekanis dengan Zn-zeolit A (1%, 3% dan 5% b/v) diikuti dengan sonikasi untuk 1 jam pada suhu kamar.

d. Karakterisasi in Silico biokomposit

Material biokomposit kitosan-zeolit-ZnO dianalisis potensinya sebagai antimicroba dan antivirus secara insilico dengan metode molecular docking menggunakan reseptor glikoprotein sebagai senyawa yang ada dalam virus covid19 maupun bakteri.

e. Karakterisasi material biokomposit aktif

Material biokomposit yang dihasilkan dikarakterisasi secara termal dengan TGA-DSC dan dilakukan uji tarik menggunakan Universal Testing Machine. Selain itu karakteristik ketebalan dan *water vapor permeability* dari material juga diuji. Untuk menguji karakter aktif dari biokomposit, uji antibakteri dilakukan antara lain terhadap bakteri pada saluran pencernaan yaitu *Streptococcus pneumonia* dan *Mycobacterium tuberculosis*

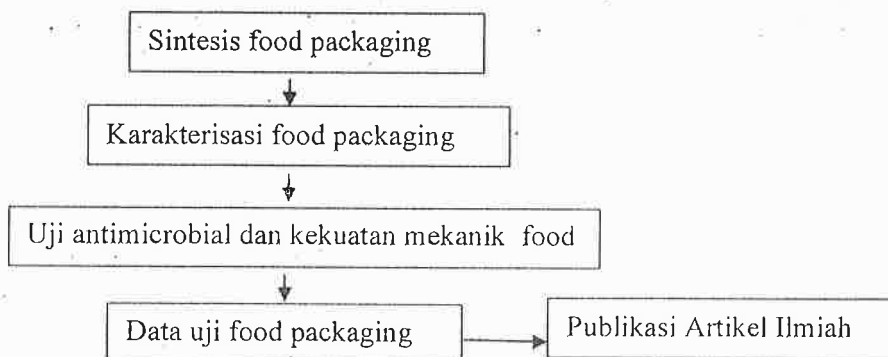
Tabel 4.1. Tahapan, Luaran dan Indikator Capaian Penelitian

No.	Tahapan Penelitian	Luaran	Indikator Capaian
1	Sintesis Material food packaging	Produk food packaging	Hasil uji karakteristik fisika kimia material dan in silico
2	Karakterisasi material food packaging	Data sifat fisik kimia food packaging	Draft Artikel Ilmiah
3	Uji antimicrobial food packaging	Data aktivitas antimicrobial food packaging	Draft Artikel Ilmiah

Tabel 4.2. Tugas Tim Peneliti Sesuai Tahapan Penelitian

Nama Peneliti	Jabatan	Peran dalam Penelitian
Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc	Ketua	- Sintesis dan karakterisasi food packaging - Uji antimicrobial food packaging
Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si	Anggota 1	Karakterisasi in silico food packaging
Dr. Amaria, M.Si	Anggota 2	Karakterisasi food packaging
Mirwa Adiprahara A., M.Si	Anggota 3	Uji antimicrobial food packaging

Diagram Alir Penelitian disajikan pada gambar 4.1



Gambar 4.1. Diagram Alir Penelitian

BAB V

HASIL DAN PEMBAHASAN

5.1. Study in Silico Material Packaging

Pada penelitian ini dilakukan kajian in silico material packaging berbahan dasar polimer alam yaitu nanokomposit kitosan-zeolit-ZnO untuk mengetahui potensi material packaging sebagai penghambat penyebaran covid-19 yaitu virus SARS Cov 2. Uji in silico material packaging dilakukan dengan metode analisis menggunakan software moleculare docking.

Model docking ligan nanokomposit kitosan-zeolit-ZnO dan reseptor molekul glikoprotein SARS CoV-2 dianalisis untuk memprediksi aktivitas antivirus nanokomposit. Afinitas pengikatan merupakan aspek penting yang harus diperhatikan dalam interaksi ligan dan reseptor. Afinitas pengikatan yang lebih rendah menunjukkan bahwa suatu senyawa memerlukan lebih sedikit energi untuk mengikat atau berinteraksi dengan reseptor. Dengan kata lain, nilai afinitas pengikatan yang lebih rendah berpotensi lebih besar untuk dapat berinteraksi dengan protein target. Sasaran yang digunakan dalam molecular docking adalah SARS-CoV-2 spike glycoprotein dengan kode PDB 6VXX. Ligan yang digunakan dalam molecular docking adalah kitosan, kitosan dalam asam, zeolit, dan ZnO. Struktur glikoprotein spike SARS-CoV-2 ditunjukkan pada gambar 5.1. Data studi docking molekuler nanokomposit kitosan-zeolit-ZnO dan glikoprotein SARS CoV-2 yaitu konstanta inhibitor secara eksperimental dan energi bebas pengikatannya ditunjukkan pada tabel 5.1.



Gambar 5.1. Struktur SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein

Tabel 5.1. Data Energi Ikatan dan Konstanta Inhibitor SARS CoV-2 Receptor

SenyawaLigand	Energi Ikatan (Kcal/mol)	Konstanta Inhibitor (mM)
Chitosan	-3,93	1,32
Larutan Chitosan	-3,37	3,37
Zeolite	-3,19	4,56
ZnO	-2,27	21,7

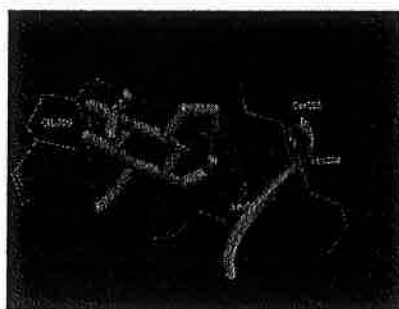
Nilai energi ikatan dengan hasil negatif sehingga pengikatan terjadi secara spontan, semakin rendah energinya maka semakin stabil senyawa tersebut dan semakin baik senyawa tersebut sebagai kandidat obat yang memungkinkan [9]. Berdasarkan data energi ikatan bebas kitosan, pada tabel 1 energi bebas ikatan kitosan sedikit lebih rendah dibandingkan energi bebas ikatan kitosan pada medium asam, zeolit dan ZnO. Energi bebas ikatan kitosan, kitosan dalam medium asam, zeolit dan ZnO juga tidak berbeda nyata, sehingga potensi antiviral nanokomposit kitosan-zeolit-ZnO diperkirakan lebih tinggi dari masing-masing komponen. Energi bebas ikatan kitosan yang lebih rendah berarti kekuatan ikatan kitosan terhadap SARS CoV-2 lebih tinggi dibandingkan zeolit dan ZnO. Semakin tinggi kekuatan kitosan dapat diprediksi bahwa kitosan berperan penting dalam aktivitas antivirus nanokomposit kitosan-zeolit-ZnO terhadap molekul glicoprotein SARS CoV-2. Berdasarkan tabel 5.1 juga dapat dianalisis bahwa konstanta inhibitor yang baik pada analisis molecular docking adalah yang lebih kecil. Semakin kecil konstanta hambat maka semakin besar spontanitas pembentukan ikatan karena delta energi bebas juga semakin kecil. Dengan demikian, potensi aktivitas antivirus meningkat.

Hasil Molecular docking divisualisasikan dengan software Biovia Discovery Studio 2019 ditunjukkan pada gambar 5.2. Berdasarkan visualisasi glikoprotein SARS CoV-2 dengan kitosan pada gambar 5.2 dapat diketahui bahwa terdapat interaksi yang melibatkan ikatan hidrogen yaitu Thr 302, Leu 303, Gln 957, dan Gln 309. Untuk kitosan dalam medium asam yang memiliki gugus amina kationik, visualisasinya ditunjukkan pada Gambar 5.3. Dapat dianalisis bahwa kitosan dalam asam dan glikoprotein SARS CoV-2 menghasilkan interaksi yang melibatkan ikatan hidrogen yaitu Glu 309, Leu 303 dan Ser 305. Visualisasi gugus Zeolit (Si-O-Al) dan glikoprotein SARS CoV-2 ditunjukkan pada Gambar 5.4. Terdapat interaksi yang melibatkan ikatan hidrogen yaitu Tyr 313, Ser 596, Gln 314 dan Gln

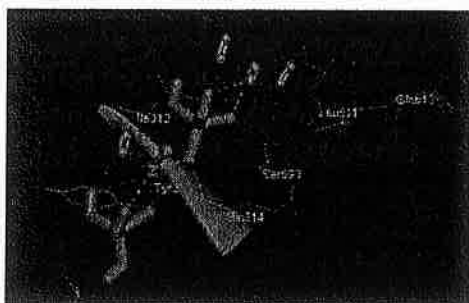
613 antara zeolit dan SARS CoV-2 glikoprotein. Molecular docking untuk glikoprotein ZnO dan SARS CoV-2 digambarkan pada Gambar 5.5. Glikoprotein ZnO dan SARS CoV-2 memperlihatkan interaksi yang melibatkan ikatan hidrogen yaitu Thr 299, Glu 298 dan Thr 315.



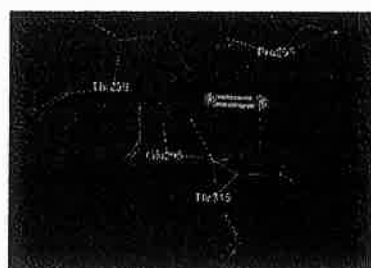
Gambar 5.2. Visualisasi ligan kitosan didocking dengan SARS CoV-2



Gambar 5.3. Visualisasi ligan larutan kitosan didocking dengan SARS CoV-2



Gambar 5.4. Visualisasi ligan zeolit didocking dengan SARS CoV-2



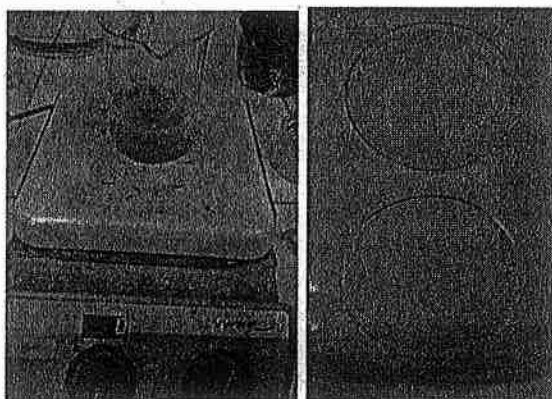
Gambar 5.5. Visualisasi ligan ZnO didocking dengan SARS CoV-2

Afinitas tinggi untuk senyawa obat tergantung pada jenis dan jumlah ikatan yang terjadi dengan situs protein aktif [10]. Kitosan membentuk banyak ikatan kimia dengan 6VXX sebagai makromolekul glikoprotein SARS CoV-2 target, termasuk ikatan hidrogen. Kitosan dalam asam, zeolit, dan ZnO juga membentuk ikatan kimia. Analisis docking pada penelitian ini menunjukkan potensi hambat beberapa senyawa ligan, diberi peringkat energi ikat pada tabel 5.1; kitosan> kitosan dalam asam> zeolit> ZnO. Hasil studi molekuler docking menggunakan senyawa kitosan-zeolit-ZnO berpotensi sebagai pengobatan SARS CoV-2.

5.2. Preparasi dan Karakterisasi Material Packaging

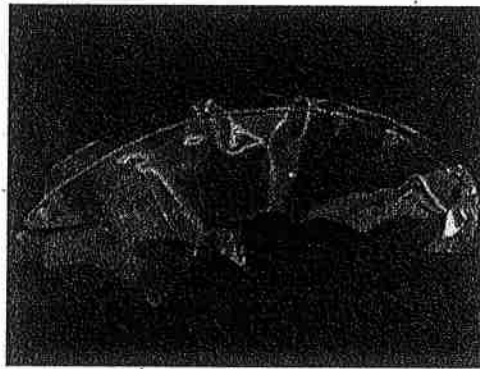
Preparasi material packaging berbahan dasar komposit kitosan-zeolit-ZnO juga telah dilakukan dalam penelitian ini. Sintesis material packaging dilakukan dengan metode pencampuran larutan kitosan dan serbuk zeolite-ZnO. Material zeolite-ZnO dipreparasi dengan metode ion exchange untuk meningkatkan persebaran partikel ZnO dalam struktur rangka zeolit. Partikel ZnO ditambahkan sebagai bahan dasar material packaging karena dapat meningkatkan warna makanan, mencegah kerusakan makanan, dan memperbaiki sifat bahan kemasan, meliputi kualitas kekuatan mekanis dan stabilitas. Hasil sintesis material packaging membentuk larutan kental yang dapat dicetak menjadi lapis tipis transparan seperti ditunjukkan pada gambar 5.6.

Pada sintesis material packaging kitosan-zeolit-ZnO ini ditambahkan pula bahan PVA sebagai pembuat film atau plemastis. PVA memiliki banyak keunggulan untuk digunakan dalam kemasan makanan film atau packaging, yaitu hidrofilisitas tinggi, stabilitas senyawa yang baik dan sifat pembentukan film yang luar biasa (Limpan, Prodpran, Benjakul, & Prasarpran, 2012; Youssef, 2013; Yu, Li, Chu, & Zhang, 2018). Polivinil alkohol (PVA) juga menawarkan berbagai atribut positif, antara lain kapasitas strukturalnya yang tinggi, karena merupakan polimer yang dapat larut dalam air, memiliki sifat untuk bersenyawa yang kuat, biodegradabilitas yang besar, dan kemudahannya untuk digunakan (Youssef, Assem et al., 2019a). PVA dapat membentuk interaksi fisik melalui gugus hidroksilnya, yang membentuk formasi ikatan hidrogen (Cano et al., 2015).



Gambar 5.6. Preparasi material packaging kitosan-zeolit-ZnO

Hasil lapis tipis material packaging berupa lapis tipis transparan yang berwarna kuning kecoklatan. Hal ini disebabkan karena zeolit alam dan kitosan yang memberikan warna kuning kecoklatan. Lapis tipis material packaging yang disintesis pada penelitian ini ditunjukkan pada gambar 5.7.

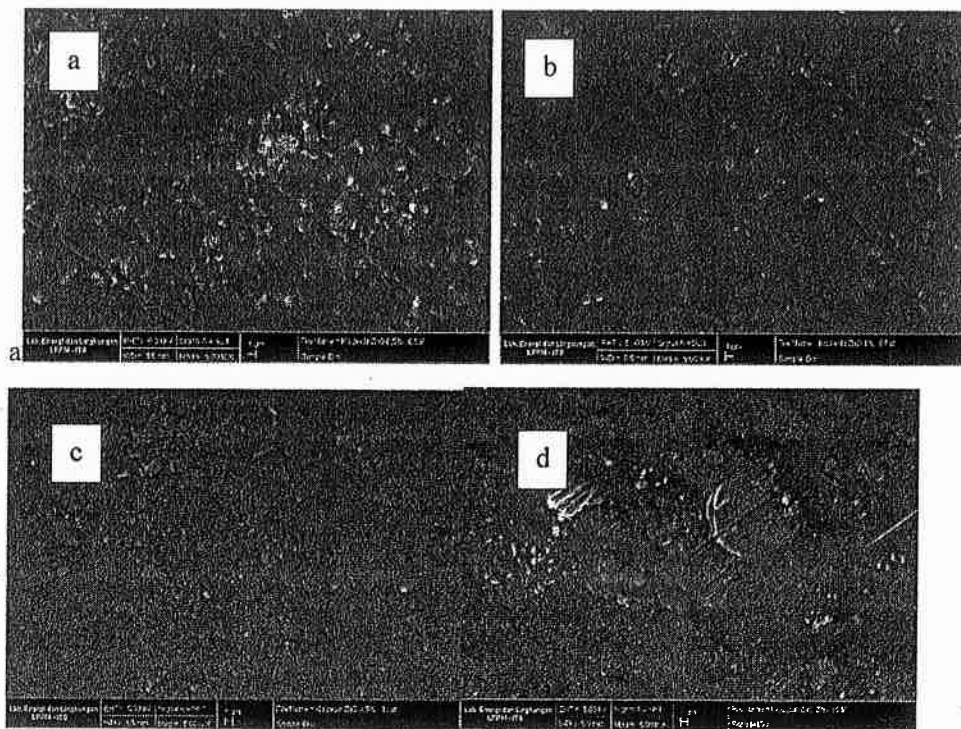


Gambar 5.7. Lapis tipis material packaging kitosan-zeolit-ZnO

Material packaging dari komposit-zeolite-ZnO yang disintesis pada penelitian ini menggunakan variasi komposisi zeolite-ZnO, dimana zeolite berfungsi sebagai matriks filler pada packaging kitosan, dan ZnO berfungsi sebagai agen antibakteri. Komposisi zeolite-ZnO yang digunakan pada penelitian ini divariasi menurut %berat/berat zeolite-ZnO dalam kitosan yaitu 0,5%; 1%, 1,5% dan 2%. Pada variasi komposisi 0,5% material packaging komposit kitosan-zeolit-ZnO yang dihasilkan memiliki warna yang lebih terang. Semakin banyak kandungan zeolite-ZnO dalam komposit, warna material packaging yang dihasilkan semakin coklat. Hal ini dikarenakan material zeolite memiliki warna coklat. Secara umum penampakan fisik komposit-zeolit-ZnO yang dihasilkan dengan beberapa variasi komposisi zeolite-ZnO tidak memiliki perbedaan yang signifikan.

5.3. Hasil Analisis Morfologi Material Packaging

Komposit kitosan-zeolit-ZnO yang telah disintesis dianalisis morfologi permukaannya dengan instrument SEM-EDX untuk mengetahui karakteristik distribusi partikel ZnO serta kehomogenan komposit yang terbentuk. Hasil analisis morfologi permukaan komposit kitosan-zeolit-ZnO ditunjukkan pada gambar 5.8.



Gambar 5.8 Morfologi permukaan material packaging a). Kitosan-zeolit-ZnO 0,5%, b). Kitosan-zeolit-ZnO 1%, c). Kitosan-zeolit-ZnO 1,5%, d). Kitosan-zeolit-ZnO 2%

Hasil analisis morfologi material packaging dengan SEM-EDX menunjukkan bahwa telah terbentuk komposit kitosan-zeolit-ZnO. Pada komposisi kitosan-zeolit-ZnO 0,5%, 1% dan 1,5% terlihat distribusi partikel yang cukup merata, namun pada komposisi kitosan-zeolit-ZnO 2% tampak adanya penggumpalan partikel yang menandakan bahwa pada konsentrasi zeolite-ZnO 2% tidak menghasilkan material packaging yang homogen. Hal ini disebabkan semakin banyak konsentrasi zeolite-ZnO, maka akan menyebabkan viskositas larutan juga semakin besar sehingga distribusi partikel ZnO dalam komposit yang dihasilkan juga tidak merata.

5.4. Hasil Uji Aktivitas Antibakteri Material *Packaging* pada Bakteri *E. Coli*

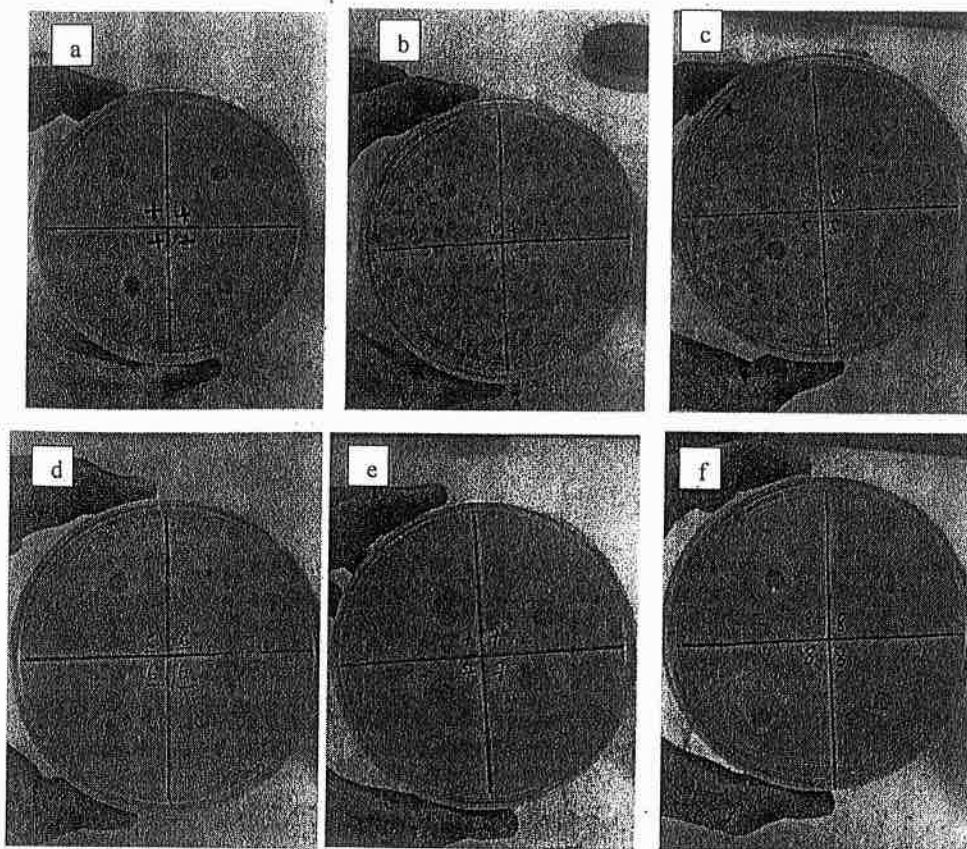
Komposit kitosan-zeolit-ZnO diuji aktivitas antibakterinya terhadap bakteri *E.coli* dengan metode *clear zone inhibition*. Kemampuan penghambatan pertumbuhan bakteri *E. Coli* oleh komposit kitosan-zeolit-ZnO dianalisis secara kualitatif menggunakan metode *disc*

diffusion test melalui *clear zone inhibition test* atau daerah penghambatan bakteri untuk mengetahui efektifitas komposit kitosan-zeolit-ZnO sebagai material packaging.. Data penghambatan pertumbuhan bakteri melalui pengukuran terhadap zona bersih pada masing-masing komposit kitosan-zeolit-ZnO disajikan dalam Tabel 5.2.

Tabel 5.2. Diameter Daerah Penghambatan Bakteri (*Clear Zone Inhibition*) Komposit Kitosan –zeolit-ZnO Terhadap Pertumbuhan Bakteri *E. Coli*

Sampel	Komposisi Zeolit-ZnO	Diameter (mm)
Kontrol negatif	-	0,0
Kontrol positif (Amoksilin)	-	10,0
Kitosan	0 %	9,0
Kitosan –zeolit-ZnO	0,5 %	6,0
Kitosan –zeolit-ZnO	1 %	6,0
Kitosan –zeolit-ZnO	1,5 %	6,0
Kitosan –zeolit-ZnO	2 %	10,0

Berdasarkan hasil pengukuran diameter zona bersih seperti ditunjukkan dalam tabel 1 dapat diketahui bahwa secara umum komposit kitosan-zeolit-ZnO pada semua komposisi memiliki kemampuan dalam menghambat pertumbuhan bakteri *E.Coli* dengan terbentuknya zona bersih. Akan tetapi pengaruh komposisi zeolite-ZnO 0,5 % sampai 1,5% tidak signifikan terhadap kemampuan penghambatan bakteri *E. Coli*. Pada komposisi zeolite-ZnO 2% kemampuan penghambatan bakteri *E. Coli* sangat tinggi dan menyerupai penghambatan bakteri *E. Coli* oleh antibiotic Amoksilin. Hal ini berarti komposisi minimum zeolite-ZnO yang memberikan nilai aktivitas antibakteri yang baik adalah di atas 2%. Semakin banyak zeolite-ZnO yang ditambahkan dalam komposit maka gugus fungsi ZnO dan kitosan dalam komposit yang dapat menghambat bakteri juga semakin banyak. Selain itu interaksi permukaan komposit zeolite-ZnO dengan bakteri juga semakin besar dengan semakin rapatnya struktur permukaan komposit. Daerah penghambatan bakteri (*clear zone inhibition*) komposit kitosan-zeolit-ZnO terhadap bakteri *E.Coli* menggunakan *disc diffusion test* disajikan pada gambar 5.9.



Gambar 5.9. Foto Zona Penghambatan Bakteri *E. Coli* oleh Komposit Kitosan-Zeolit-ZnO a). Amoksilin, b) Kitosan-zeolit-ZnO 0,5%, c). Kitosan-zeolit-ZnO 1%, d) Kitosan-zeolit-ZnO 1,5%, e) Kitosan-zeolit-ZnO 2%, f) Kitosan

BAB VII

KESIMPULAN DAN SARAN

7.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa :

1. Dari hasil studi *in silico* material packaging berbahan dasar kitosan-zeolit-ZnO, diketahui bahwa material packaging tersebut memiliki potensi untuk digunakan sebagai material penghambat virus SARS Cov-2. Data nilai konstanta penghambatan dan energy ikat dengan metode molecular docking menunjukkan bahwa kitosan memiliki potensi paling tinggi yang berperan dalam menghambat virus SARS Cov-2. Hasil preparasi material packaging telah didapatkan struktur lapis tipis yang dapat diaplikasikan sebagai packaging.
2. Hasil morfologi komposit kitosan-zeolit-ZnO yang telah disintesis menunjukkan telah terbentuk campuran Kitosan, zeolite dan ZnO dengan distribusi ZnO yang merata pada komposisi 0,5%, 1%, dan 1,5%.
3. Hasil uji aktivitas antibakteri terhadap bakteri *E. Coli* menunjukkan bahwa penghambatan terbesar dimiliki oleh komposit dengan komposisi zeolite-ZnO 2%

7.2. Saran

Saran pada penelitian ini yaitu perlu adanya karakterisasi jumlah ZnO yang terdistribusi dalam komposit pada tiap-tiap komposisi sehingga dapat diketahui berapa konsentrasi optimum ZnO yang dapat memberikan hasil terbaik pada komposit kitosan-zeolit-ZnO untuk karakteristik fisik dan kimianya..

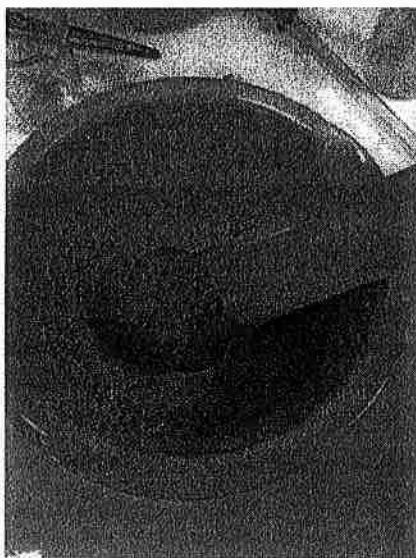
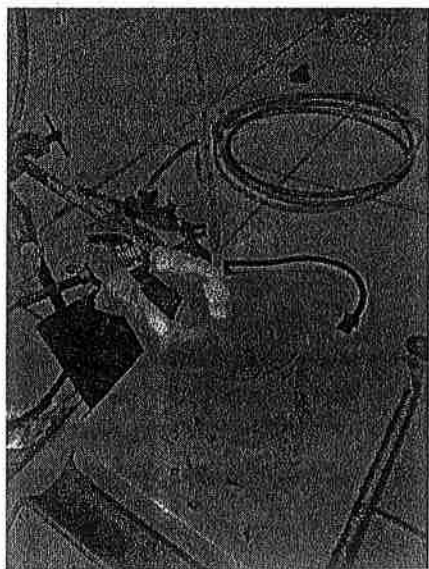
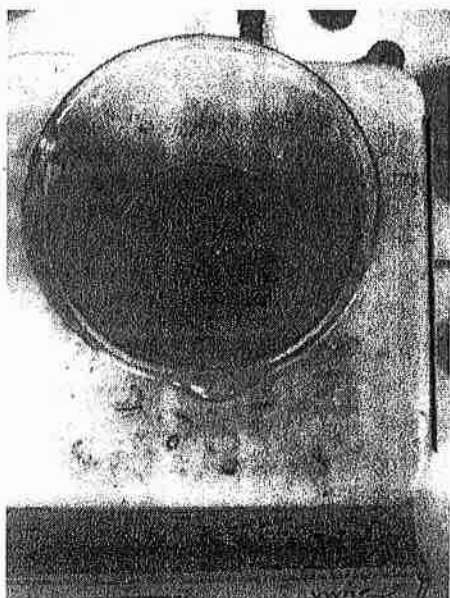
DAFTAR PUSTAKA

1. D. Trache, M.H. Hussin, C.T. Hui Chuin, S. Sabar, M.R.N. Fazita, O.F.A. Taiwo, T.M. Hassan, M.K.M. Haafiz, Microcrystalline cellulose: Isolation, characterization and bio-composites application—A review, *Int. J. Biol. Macromol.* 93 (2016) 789–804..
2. S.M.L. Rosa, N. Rehman, M.I.G. De Miranda, S.M.B. Nachtigall, C.I.D. Bica, Chlorine-free extraction of cellulose from rice husk and whisker isolation, *Carbohydr. Polym.* 87 (2012) 1131–1138.
3. J.W. Rhim, H.M. Park, C.S. Ha, Bio-nanocomposites for food packaging applications, *Prog. Polym. Sci.* 38 (2013) 1629–1652.
4. A.M. Youssef, S.M. El-Sayed, Bionanocomposites materials for food packaging applications: Concepts and future outlook, *Carbohydr. Polym.* 193 (2018) 19–27.
5. H. Namazi, A. Dadkhah, Convenient method for preparation of hydrophobically modified starch nanocrystals with using fatty acids, *Carbohydr. Polym.* 79 (2010) 731–737
6. Perinelli, D. R., Fagioli, L., Campana, R., Lam, J. K. W., Baffone, W., Palmieri, G. F., et al. (2018). Chitosan-based nanosystems and their exploited antimicrobial activity. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 117, 8–20
7. Silberbauer, A., & Schmid, M. (2017). Packaging concepts for ready-to-eat food: Recent progress. *Journal of Packaging Technology and Research*, 1(3), 113–126.
8. C. Kenyó, K. Renner, J. Móczó, E. Fekete, C. Kröhnke, B. Pukánszky, Hips/zeolite hybrid composites as active packaging materials: Structure and functional properties, *Eur. Polym. J.* 103 (2018) 88–94.
- 9.
10. A. Mihaly-Cozmuta, A. Peter, G. Craciun, A. Falup, L. Mihaly-Cozmuta, C. Nicula, A. Vulpoi, M. Baia, Preparation and characterization of active cellulose-based papers modified with TiO₂, Ag and zeolite nanocomposites for bread packaging application, *Cellulose*. 24 (2017) 3911–3928.
11. S. Demirci, Z. Ustaoglu, G.A. Yilmazer, F. Sahin, N. Baç, Antimicrobial properties of zeolite-X and zeolite-A ion-exchanged with silver, copper, and zinc against a broad range of microorganisms, *Appl. Biochem. Biotechnol.* 172 (2014) 1652–1662.
12. P. Dutta, B. Wang, Zeolite-supported silver as antimicrobial agents, *Coord. Chem. Rev.* 383 (2019) 1–29.
13. A. Dey, S. Neogi, Oxygen scavengers for food packaging applications: A review, *Trends Food Sci. Technol.* 90 (2019) 26–34.
14. R. Gaikwad, A. Bansode, A. Urakawa, High-pressure advantages in stoichiometric hydrogenation of carbon dioxide to methanol, *J. Catal.* 343 (2016) 127–132.
15. D.S. Lee, Carbon dioxide absorbers for food packaging applications, *Trends Food Sci. Technol.* 57 (2016) 146–155.
16. I. Majid, G. Ahmad Nayik, S. Mohammad Dar, V. Nanda, Novel food packaging technologies: Innovations and future prospective, *J. Saudi Soc. Agric. Sci.* 17 (2018) 454–462.
17. G.F. El Fawal, A.M. Omer, T.M. Tamer, Evaluation of antimicrobial and antioxidant activities for cellulose acetate films incorporated with Rosemary and Aloe Vera essential oils, *J. Food Sci. Technol.* 56 (2019) 1510–1518.
18. P. Dutta, B. Wang, Zeolite-supported silver as antimicrobial agents, *Coord. Chem. Rev.* 383 (2019) 1–29.

19. I. Ahmed, H. Lin, L. Zou, A.L. Brody, Z. Li, I.M. Qazi, T.R. Pavase, L. Lv, A comprehensive review on the application of active packaging technologies to muscle foods, *Food Control*. 82 (2017) 163–178.
20. S.H. Othman. (2014) Bio-nanocomposite Materials for Food Packaging Applications: Types of Biopolymer and Nano-sized Filler, *Agriculture and Agricultural Science Procedia*. 2 (2014) 296 - 303
21. Rhim, J.-W., 2011. Water Vapor Adsorption Isotherms of Agar-Based Nanocomposite Films. *Journal of Food Science* 76, N68-N72.
22. Azeredo, H.M.C.D., Mattoso, L.H.C., McHugh, T.H., 2011. Nanocomposites in Food Packaging – A Review, in *Advances in Diverse Industrial Applications of Nanocomposites*. In: Reddy, B. (Ed.), InTech. Available from: H.F. Youssef, M.E. El-Naggar, F.K. Fouda, A.M. Youssef, Antimicrobial packaging film based on biodegradable CMC/PVA-zeolite doped with noble metal cations, *Food Packag. Shelf Life*. 22 (2019) 100378.
23. Vellingiri, K, Ramachandran, R, Senthilkumar, M., 2013, Eco-friendly Application of Nano Chitosan in Antimicrobial Coatings in the Textile Industry, *Nanoscience and Nanotechnology*, 3(4): 75-89
24. C. Kenyó, K. Renner, J. Móczó, E. Fekete, C. Kröhnke, B. Pukánszky, Hips/zeolite hybrid composites as active packaging materials: Structure and functional properties, *Eur. Polym. J.* (2018).
25. H.F. Youssef, M.E. El-Naggar, F.K. Fouda, A.M. Youssef, Antimicrobial packaging film based on biodegradable CMC/PVA-zeolite doped with noble metal cations, *Food Packag. Shelf Life*. 22 (2019) 100378.
26. J. Milenkovic, J. Hrenovic, D. Matijasevic, M. Niksic, N. Rajic, Bactericidal activity of Cu-, Zn-, and Ag-containing zeolites toward *Escherichia coli* isolates, (n.d.).
26. S. Demirci, Z. Ustaoglu, G.A. Yilmazer, F. Sahin, N. Baç, Antimicrobial properties of zeolite-X and zeolite-A ion-exchanged with silver, copper, and zinc against a broad range of microorganisms, *Appl. Biochem. Biotechnol.* 172 (2014) 1652–1662.
27. S. Singh, M. ho Lee, I. Park, Y.J. Shin, Y.S. Lee, Antimicrobial properties of polypropylene films containing AgSiO₂, AgZn and AgZ for returnable packaging in seafood distribution, *J. Food Meas. Charact.* 10 (2016) 781–793.
28. A. Mihaly-Cozmuta Anca Peter Grigore Craciun Anca Falup Leonard Mihaly-Cozmuta Camelia Nicula Adriana Vulpoi Monica Baia, Preparation and characterization of active cellulose-based papers modified with TiO₂, Ag and zeolite nanocomposites for bread packaging application, *Cellulose*. 24 (n.d.).
29. Raghupathi, R., Ranjit Koodali, T. and Adhar Manna, C. 2011. Size-dependent bacterial growth inhibition and mechanism of antibacterial activity of zinc oxide nanoparticles. *Langmuir*, 27, 4020–4028
30. Selvam, S. and Sundrarajan, M., 2012, Functionalization of cotton fabric with PVP/ZnO nanoparticles for improved reactive dyeability and antibacterial activity, *Carbohydrate Polymers*, vol. 87, 1419–1424

Lampiran

Dokumentasi kegiatan penelitian



Molecular Docking Analysis Chitosan-Zeolite-ZnO Nanocomposite and Its Potency Against SARS-CoV-2

D K Maharani*, I G M Sanjaya, A Amaria, M A Anggraeni, L R Jannah

Chemistry Department, Universitas Negeri Surabaya

Surabaya, Indonesia

*dinakartika@unesa.ac.id

Abstract. Nanocomposite has gain great attention in many applications due to its better properties in nanoscale. Chitosan-Zeolite-ZnO nanocomposite were prepared via sol-gel method and were analysed by molecular docking study to predict its antiviral activity against SARS CoV-2. The SARS CoV-2 glycoprotein as receptor from RCSB PDB and complex ligand of Chitosan-Zeolite and ZnO were chosen as interaction model between ligand and receptor. According to free binding energy, it was found that chitosan has better potency in nanocomposite against SARS Cov-2.

1. Introduction

Virus is one of important cause of a serious worldwide viral infections problem that threatens human health. Thus, the development of effective and safe antiviral drugs is essential to inhibit the virus in the human cell. Today, a large number of antiviral drugs have serious negative effects, making it difficult to develop highly safe antiviral agents without side effects [1]. Nanotechnology is an advanced approach for the antiviral application and also for the delivery system of currently antiviral drugs which modify their physico-chemical properties, reduce the negative effects and reach effective drug concentrations in the sites of infection [2]. Polymer-based nanomaterial have been investigated for the drug delivery of active molecules which have some advantages such as controlled release, safety profile, enhanced residence time, and good mucosal tissue penetration. Additionally, some natural polymer which have mucoadhesive properties, such as chitosan, alginate, cellulose derivative, carrageenan, pectin, polyacrylate, thiolated polymers, and carbomer, have been studied in order to improve retention of nanoparticle in vaginal tract and permeation through mucus and epithelium [3].

Polysaccharide is a macromolecular compounds which is usually found in animals, plants and microorganisms. Many research have shown that polysaccharides and its derivatives have a significant inhibitory effect against some viruses for example human immunodeficiency virus (HIV), coxsackievirus B3 (CVB3), herpes simplex virus (HSV), cytomegalovirus (CMV), hepatitis and influenza virus. At present, the polysaccharides is promisingly material that can improve their biological activities through the modification of natural polysaccharides. The ongoing research of antiviral drugs from natural polysaccharide focus on its advantages, such as wide sources, strong antiviral activity, low toxicity and negative effects [1].

Chitosan is one of polysaccharide from animal which has been studied as antiviral agent. Chitosan-nanomaterial composites have been found to be significantly useful in improving its antimicrobial, chemical and mechanical properties. The incorporation of nanomaterial-fillers into the chitosan matrix is an effective approach to increase mechanical and thermal properties, and also low transparency compared to the natural polymer. The addition of nanomaterial-fillers (having dimension in nanometer) to natural polymers also result in improvement of physicochemical and biological properties[4]. Metal oxide nanomaterial such as titanium dioxide

(TiO₂), zinc oxide (ZnO), copper oxide (CuO), have been reported to have excellent antimicrobial activity, because the production of reactive oxygen species (ROS) [5]. Nanomaterial ZnO and TiO₂ have photocatalytic properties, which lead to loss of membrane integrity through promote peroxidation of the phospholipids present in microbial cell membranes [6].

Zeolites are natural geopolymer used widely as adsorbents, ion-exchangers, catalysts, and molecular sieves. Recent studies have been suggesting zeolite for application of antimicrobial delivery system because it can encapsulate/trap a large number of small molecules in their cage-like structures. Many investigations have shown that zeolites ion-exchanged with these metals, increase its antimicrobial activity. Zeolite loaded with some metal such as zinc, silver, copper and other antimicrobial metals act as inorganic bactericide and disinfectants which are release slowly and having excellent safety and thermal stability when compared to organic one [7]

In this research chitosan based nanocomposite was investigated its potency as antiviral agent against SARS CoV-2 through molecular docking in silico study. Molecular docking is one an efficient tool to investigate ligand-receptor interactions. All step of molecular docking calculations were performed on AutoDock software and The AutoDock Tools (ADT) graphical user interface was used to calculate Kollman charges for the protein and to add polar hydrogen. Computational procedure in molecular docking is used to predict non-covalent binding of macromolecules between macromolecule (receptor) and a small molecule (ligand) efficiently, starting with their unbound structures, structures obtained from MD simulations, or homology modeling, etc [8]. The aim of this present study is to predict the binding affinity and inhibition constant of chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite.

2. Method

2.1. Material

Software which is used in this research are: Autodock Tools version 4.01, Protein data bank site (PDB) www.RCSB.org, that code 6VXX, molecular modeling uses Avogadro 1.2.0 for the ligand and the molecular docking results are then visualized using Biovia Discovery Studio 2019.

2.2. Method

The complex structure of SARS CoV-2 glycoprotein macromolecule is obtained through Protein Data Bank searching via www.RCSB.org with code PDB 6VXX. The structure of Chitosan-Zeolite-ZnO nanocomposite was drawn using Avogadro 1.2.0 software and optimized with ab initio method using software of Games. The docking of Chitosan-Zeolite-ZnO nanocomposite and SARS CoV-2 glycoprotein macromolecule using Autodock Tools 1.5.6. The grid center for docking was set X= 197.81, Y= 223.407 and Z= 207.379 with dimensions of the grid box 60 × 60 × 60 Å. Finally, the result of binding energy and an inhibitor constant was optimized from the software. The result of molecular interaction then analysed and visualized using Biovia Discovery Studio 2019 software.

3. Result and Discussion

The docking model of chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite ligand and SARS CoV-2 glycoprotein molecules receptor are analyzed to predict nanocomposite antiviral activity. Binding affinity is an important aspect that must be considered in ligand and receptor interactions. A lower binding affinity indicates that a compound requires less energy to bind or interact with the receptor. In other words, a lower binding affinity value has a greater potential to be able to interact with the target protein. The targets used in molecular docking are SARS-CoV-2 spike glycoprotein with code PDB 6VXX. The ligands used in

molecular docking are chitosan, chitosan in acid, zeolite and ZnO . The structure of SARS-CoV-2 spike glycoprotein is shown in figure 1. The molecular docking study of chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite and SARS CoV-2 glycoprotein inhibitors constant experimentally and their free energy of binding are shown in table 1.

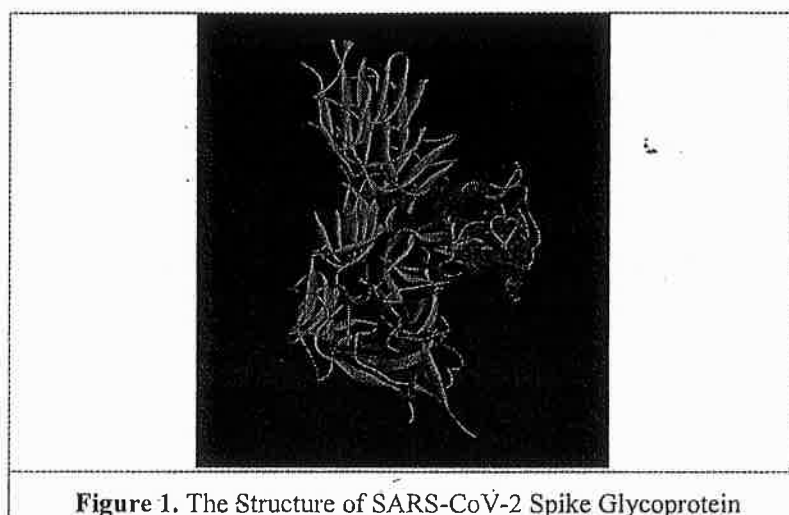


Table 1 Binding Energy and Inhibitors Constant of SARS CoV-2 Receptor

Compound Ligand	Binding Energy (Kcal/mol)	Inhibitors constant (mM)
Chitosan	-3,93	1,32
Chitosan in Acid	-3,37	3,37
Zeolite	-3,19	4,56
ZnO	-2,27	21,7

The value of binding energy with a negative result so that binding occurs spontaneously, the lower the energy, the more stable the compound and the better the compound as a possible drug candidate [9]. Based on the free binding energy data, in table 1, the binding free energy of Chitosan is slightly lower than binding free energy of chitosan in acid medium, Zeolite and ZnO. The binding free energy of chitosan, chitosan in acid medium, zeolite and ZnO moreover is not different significantly, therefore the antiviral potency of chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite are predicted become higher than each component. The lower binding free energy of chitosan means that the binding strength of chitosan to SARS CoV-2 is higher than than zeolite and ZnO. The higher strength of chitosan could be predicted that chitosan play an important role in antiviral activity of chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite against SARS CoV-2 glycoprotein molecule. According to table 1, it also can be analysed that good inhibitor constant in the molecular docking analysis is the smaller one. The smaller inhibition constant, the greater spontaneity of bond formation because the delta of free energy is also getting smaller. Thus, it mean that the potency of antiviral activity increase.

The results of Molecular docking were visualized with the Biovia Discovery Studio 2019 software is shown in figure 2. Based on visualization of SARS CoV-2 glycoprotein with chitosan in figure 2, it can be shown that there is an interaction involving hydrogen bonds which were Thr 302, Leu 303, Gln 957, dan Gln 309. For chitosan in acidic medium, which has cationic amine group, the visualisation are shown in Figure 3. It can be analysed that Chitosan in acid dan SARS

CoV-2 glycoprotein generate an interaction involving hydrogen bonds which were Glu 309, Leu 303 dan Ser 305. The visualisation of Zeolit (Si-O-Al) group dan SARS CoV-2 glycoprotein are shown in Figure 4. There is an interaction involving hydrogen bonds which were Tyr 313, Ser 596, Gln 314 dan Gln 613 between zeolite and SARS CoV-2 glycoprotein. Molecular docking for ZnO and SARS CoV-2 glycoprotein are depicted in Figure 5. The ZnO dan SARS CoV-2 glycoprotein shown an interaction involving hydrogen bonds which were Thr 299, Glu 298 dan Thr 315.

Figure 2. Visualization of Chitosan Ligand docked with SARS CoV-2	Figure 3. Visualization of Chitosan in acid Ligand docked with SARS CoV-2
Figure 4. Visualization of Zeolite Ligand docked with SARS CoV-2	Figure 5. Visualization of ZnO Ligand docked with SARS CoV-2

The high affinity for the drug compound depends on the type and number of bonds that occur with the active protein site [10]. Chitosan forms many chemical bonds with 6VXX as target SARS CoV-2 glycoprotein macromolecule, including hydrogen bonds. Chitosan in acids, zeolites and ZnO also form chemical bonds. The docking analysis in this study shows the inhibitory potential of several ligand compounds, ranked by binding energy in table 1; chitosan> chitosan in acid> zeolite> ZnO. The results of molecular docking studies using chitosan-zeolite-ZnO compounds can have potential as treatment SARS CoV-2.

4. Conclusion

A study of molecular docking analysis have been investigated in order to predict the antiviral activity of chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite against SARS CoV-2 glycoprotein macromelucule. Among several ligand contained in the nanocomposite, chitosan showed better binding activity to SARS

CoV-2 glycoprotein molecule indicated by value of the binding energy which is lower than ZnO and zeolite ligand. It can be concluded that chitosan-zeolite-ZnO nanocomposite are potential to be an antiviral agent against SARS CoV-2 which Chitosan played more role in antiviral activity.

5. References

- [1] Chen L and Huang G 2018 The antiviral activity of polysaccharides and their derivatives *Biological macromolecule* doi10.1016/j.ijbiomac.2018.04.056
- [2] Lembo D, Swaminathan S, Donalisio M, Civra A, Pastero L, Aquilano D, Vavia P, Trotta F and Cavalli R 2013 Encapsulation of Acyclovir in new carboxylated cyclodextrin-based nanosponges improves the agent 's antiviral efficacy *Int. J. Pharm.* **443** 262–72
- [3] Donalisio M, Argenziano M, Rittà M, Bastiancich C, Civra A, Lembo D and Cavalli R 2020 University of Turin *Int. J. Pharm.* 119676
- [4] Kumar S, Mukherjee A and Dutta J 2020 Trends in Food Science & Technology Chitosan based nanocomposite films and coatings : Emerging antimicrobial food packaging alternatives **97** 196–209 Shulman L 1987 Knowledge and Teaching: Foundations of the New Reform *Harv. Educ. Rev.*
- [5] Maleki S, Lot F, Barzegar-jalali M and Ag O 2014 Antimicrobial activity of the metals and metal oxide nanoparticles **44** 278–84 Shulman L S 1986 Those Who Understand: Knowledge Growth in Teaching *Educ. Res.* **15** 4–14
- [6] André R S, Zamperini C A, Mima E G, Longo V M, Albuquerque A R, Sambrano J R, Machado A L, Carlos E, Hernandez A C, Varella J A and Longo E 2015 Antimicrobial activity of TiO₂ : Ag nanocrystalline heterostructures : Experimental and theoretical insights UNESP - Universidade Estadual Paulista , Grupo de Modelagem e Simulação *Chem. Phys.*
- [7] Tekin R and Bac N 2016 Microporous and Mesoporous Materials Antimicrobial behavior of ion-exchanged zeolite X containing fragrance *Microporous Mesoporous Mater.* **234** 55–60 Chang, Mae Chu; Shaeffer, Sheldon; Al-Samarrai, Samer; Ragatz, Andrew B.; de Ree, Joppe and Stevenson R 2014 *Teacher reform in Indonesia - World Bank*
- [8] Haryadi W molecular docking of 3-o-micarocylmicaminocyl-5-o-forosaminylerthronolide-b (mmfe) to rRNA 23s deinococcus radiodurans and the prediction of its antibiotic potency 153–5
- [9] Patankar, S. (2020). Deep learning-based computational drug discovery to inhibit the RNA Dependent RNA Polymerase: application to SARS-CoV and COVID-19. OSF Preprints. doi:10.31219/osf.io/6kpbg
- [10] Khaerunnisa, S., Kurniawan, H., Awaluddin, R., Suhartati, S., & Soetjipto, S. (2020). Potential Inhibitor of COVID-19 Main Protease (Mpro). *Preprints*, 1-14. doi:10.20944/preprints202003.0226.v1

Acknowledgments

This research was supported by Faculty of Mathematics and Science Universitas Negeri Surabaya and academic affairs Universitas Negeri Surabaya.

Bukti Keikutsertaan Sebagai Pemakalah pada Seminar Internasional
International Joint Conference of Science and Technology (IJCST) Tanggal 16-17 October
2020



LEMBAR PEMBAHASAN

Laporan akhir Penelitian Kebijakan yang berjudul :

Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19

Dengan tim peneliti berikut :

Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc.	NIDN.	0006068204
Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si	NIDN.	0004126505
Dr. Amaria, M.Si	NIDN.	0029066401
Mirwa Adiprahara A., S.Si., M.Si	NIDN	0021048603

Telah dipaparkan pada tanggal 30 November 2020 secara online.

Catatan:

Hasil Review Penelitian Kebijakan, masukan dari reviewer:

1. Sudah bagus pelaksanaan penelitian sudah sesuai rencana, artikel sudah submitted di prosiding internasional
2. Tolong format laporan disesuaikan dengan format Laporan Akhir

Surabaya, 30 November 2020
Reviewer,



Prof. Dr. Endang Susantini, M.Pd
NIP 196607131991032001

PENGESAHAN DARI PEMBAHAS

Laporan akhir Penelitian Kebijakan yang berjudul :

Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19

Dengan tim peneliti berikut :

Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc.
Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si
Dr. Amaria, M.Si
Mirwa Adiprahara A., S.Si., M.Si

NIDN. 0006068204
NIDN. 0004126505
NIDN. 0029066401
NIDN. 0021048603

Sudah direvisi berdasarkan masukan pembahas

Surabaya, 2 Desember 2020

Reviewer,



Prof. Dr. Endang Susantini, M.Pd
NIP 196607131991032001

LEMBAR PEMBAHASAN

Laporan akhir Penelitian Kebijakan yang berjudul :

Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19

Dengan tim peneliti berikut :

Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc.	NIDN.	0006068204
Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si	NIDN.	0004126505
Dr. Amaria, M.Si	NIDN.	0029066401
Mirwa Adiprahara A., S.Si., M.Si	NIDN	0021048603

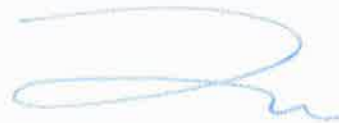
Telah dipaparkan pada tanggal 1 Desember 2020 secara online.

Catatan:

Hasil Review Penelitian Kebijakan, masukan dari reviewer:

1. Sudah bagus pelaksanaan penelitian sudah sesuai rencana, artikel sudah submitted di prosiding internasional
2. Tolong format laporan disesuaikan dengan format Laporan Akhir

Surabaya, 1 Desember 2020
Reviewer,



Dr. Sunu Kuntjoro, M.Si.
NIP 197206231998021001

PENGESAHAN DARI PEMBAHAS

Laporan akhir Penelitian Kebijakan yang berjudul :

Antimicrobial Food Packaging Berbahan Dasar Material Alam Lokal Sebagai Upaya Pencegahan Penyebaran Covid-19

Dengan tim peneliti berikut :

Dina Kartika Maharani, S.Si., M.Sc.

Dr. I Gusti Made Sanjaya, M.Si

Dr. Amaria, M.Si

Mirwa Adiprahara A., S.Si., M.Si

NIDN. 0006068204

NIDN. 0004126505

NIDN. 0029066401

NIDN 0021048603

Sudah direvisi berdasarkan masukan pembahas

Surabaya, 3 Desember 2020

Reviewer,



Dr. Sunu Kuntjoro, M.Si.
NIP 197206231998021001