

ABSTRAK

YUGA PRATAMA, 2024, ANALISIS PENAMBATAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA TANAMAN BAWANG DAYAK (*Eleutherine bulbosa* (Mill.) URB.) SEBAGAI KANDIDAT ANTIBAKTERI *Methicillin Resistant Staphylococcus aureus*, TESIS, PROGRAM STUDI S2 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI SURAKARTA, Pembimbing utama Dr. apt. Rina Herowati, M.Si, Pembimbing pendamping Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si.

Resistensi antibiotik merupakan salah satu permasalahan dalam dunia kesehatan, salah satunya MRSA. Peningkatan infeksi MRSA yang semakin berkembang menjadi bukti nyata bahwa penanganan dan pengobatan penyakit tersebut masih belum memadai sehingga dibutuhkan obat yang tepat yaitu sebagai antibakteri terhadap MRSA. sejumlah senyawa aktif dari bahan alam telah menunjukkan aktifitas antibakteri potensial salah satunya adalah tanaman bawang dayak (*Eleutherine bulbosa*). Upaya pengembangan obat dapat dilakukan dengan pemodelan molekul atau uji *in silico* salah satunya adalah penambatan molekul, simulasi dinamika dan prediksi farmakokinetik.

Sebanyak 15 senyawa dalam tanaman bawang dayak yang ditambatkan pada 4 target molekul yaitu SSCMec, MecR1, pbp2a, dan BlaR1 menggunakan metode penambatan molekul yakni Autodock 4.0. Senyawa dalam tanaman bawang dayak yang memiliki interaksi terbaik, selanjutnya dianalisis menggunakan metode simulasi MD untuk mengetahui stabilitas ikatannya dan dilanjutkan melihat profil farmakokinetik.

Berdasarkan hasil penambatan molekul senyawa yang diprediksi memiliki afinitas pengikatan terbaik dan memiliki pola interaksi yang sama dengan ligan alami terhadap target molekulernya adalah senyawa Eleucananones A, B dan Eleuthoside B. Hasil simulasi MD menunjukkan bahwa dari grafik RMSD dan RMSF pada molekul target kerja MRSA senyawa Eleucananones A, B dan Eleuthoside B memiliki stabilitas yang mendekati ligan asli. Hasil prediksi profil farmakokinetik menunjukkan bahwa senyawa Eleucananones A, B dan Eleuthoside B memiliki profil ADMET yang kurang baik.

Kata Kunci: Molekuler Docking, Dinamika Molekuler, MRSA, Bawang Dayak.

ABSTRACT

YUGA PRATAMA, 2024, TETHERING ANALYSIS AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF DAYAK ONION PLANT COMPOUNDS (Eleutherine bulbosa (Mill.) URB.) AS AN ANTIBACTERIAL CANDIDATE Methicillin Resistant Staphylococcus aureus, THESIS, S2 PHARMACY STUDY PROGRAM, FACULTY OF PHARMACY, UNIVERSITAS SETIA BUDI SURAKARTA, Main supervisor Dr. apt. Rina Herowati, M.Si, Nuraini Harmastuti's co-supervisor, S.Si., M.Si.

Antibiotic resistance is one of the problems in the world of health, one of which is MRSA. The increasing number of MRSA infections that are growing is clear evidence that the handling and treatment of the disease is still inadequate so appropriate drugs are needed, namely as antibacterial against MRSA. A number of active compounds from natural ingredients have shown potential antibacterial activity, one of which is the Dayak onion plant (*Eleutherine bulbosa*). Drug development efforts can be carried out by molecular modeling or in silico tests, one of which is molecular tethering, dynamics simulation, and pharmacokinetic prediction.

A total of 15 compounds in Dayak onion plants tethered to 4 molecular targets, namely SSCMec, MecR1, pbp2a, and BlaR1 using the molecular tethering method, namely Autodock 4.0. Compounds in Dayak onion plants that have the best interaction, are then analyzed using the MD simulation method to determine the stability of the bond and continue to look at the pharmacokinetic profile.

Based on the results of molecular tethering, compounds that are predicted to have the best binding affinity and have interaction patterns similar to natural ligands to their molecular targets are Eleucananones A, B, and Eleuthoside B compounds. The results of MD simulations show that from the RMSD and RMSF graphs on MRSA work target molecules, Eleucananones A, B and Eleuthoside B compounds have stability close to the original ligand. The results of pharmacokinetic profile prediction show that Eleucananones A, B, and Eleuthoside B compounds have a poor ADMET profile.

Keywords: Molecular Docking, Molecular Dynamics, MRSA, *Eleutherine Bulbosa*.