

SKRIPSI SARJANA FARMASI

**STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA AKTIF DARI
JAHE MERAH (*Zingiber officinale var. rubrum*)
SEBAGAI ANTIBAKTERI**



**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG**

2024

SKRIPSI SARJANA FARMASI

**STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA AKTIF DARI
JAHE MERAH (*Zingiber officinale var. rubrum*)
SEBAGAI ANTIBAKTERI**



**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2024**

ABSTRAK

STUDI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA AKTIF DARI JAHE MERAH (*Zingiber officinale var. rubrum*) SEBAGAI ANTIBAKTERI

Oleh:

DHIA FADHILAH

NIM: 2011012053

(Program Studi Sarjana Farmasi)

Tingkat resistensi antibiotik yang terus meningkat menjadi tantangan peneliti untuk menemukan kandidat obat antibiotik baru. Senyawa dari bahan alam seperti jahe merah (*Zingiber officinale var. rubrum*) dapat dijadikan sumber dalam penemuan kandidat antibakteri baru. Senyawa jahe merah telah dilaporkan memiliki aktivitas antibakteri. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengkaji *binding affinity* (kcal/mol), interaksi, dan profil ADMET senyawa kandungan jahe merah terhadap protein target antibakteri melalui simulasi *molecular docking*. Penelitian ini menggunakan empat protein target antibakteri dengan kode PDB 2W9G, 5L3J, 5OJ0, dan 1FJG. Protokol *docking* ini menggunakan *software* Schrödinger dan prediksi ADMET menggunakan SwissADME, pkCSM, dan Prottox. Hasil simulasi *docking* protein target DNA Gyrase subunit B menunjukkan bahwa (-)-epicatechin, (+)-catechin, dan rutin memiliki *score docking* terbaik dibandingkan *native ligand* benzothiazole. Protein target dihydrofolate reductase dengan *native ligand* trimethoprim memiliki *score docking* terbaik yaitu hexahydro-curcumin. Hasil simulasi *docking* dengan protein target PBP 2X dengan *native ligand* cefepime menunjukkan *score docking* terbaik yaitu rutin, morin, dan (-)-epicatechin. Hasil simulasi *docking* dengan protein target 30s ribosom dengan *native ligand* streptomisin menunjukkan *score docking* terbaik yaitu anthocyanin, apigenin, dan quercetin. Hasil prediksi ADMET menunjukkan semua senyawa memiliki absorpsi GI yang baik kecuali rutin. Senyawa anthocyanin dapat terdistribusi ke BBB. Beberapa senyawa bersifat sebagai inhibitor CYP dan substrat P-gp. Total clearance senyawa berada pada rentang -0,369 hingga 0,716 dan tidak ada yang bertindak sebagai substrat Renal OCT2. Prediksi toksisitas menunjukkan bahwa anthocyanin dan quercetin bersifat mutagenik. Kelas toksisitas nya berada pada rentang kelas 3 sampai 6. Dari hasil diatas dapat disimpulkan bahwa senyawa aktif jahe merah dapat berpotensi pada 4 mekanisme kerja antibakteri.

Kata kunci: Jahe merah, *molecular docking*, antibakteri, ADMET

ABSTRACT

MOLECULAR DOCKING STUDIES OF ACTIVE COMPOUND FROM RED JAHE (*Zingiber officinale var. rubrum*) AS ANTIBACTERIALS

By:

DHIA FADHILAH

Student ID Number: 2011012053

(Bachelor of Pharmacy Study Program)

The increasing level of antibiotic resistance challenged researchers to find new antibiotic drug candidates. Compounds from natural materials such as red ginger (*Zingiber officinale var. rubrum*) were used as a source in the discovery of new antibacterial candidates. Red ginger compounds have been reported to have antibacterial activity. The purpose of this study was to assess the binding affinity (kcal/mol), interaction, and the ADMET profile of red ginger compounds against antibacterial target proteins through molecular docking simulation. This study used four antibacterial target proteins were PDB codes 2W9G, 5L3J, 5OJ0, and 1FJG. This docking protocol uses Schrödinger software and the ADMET prediction using SwissADME, pkCSM, and Protox. The docking simulation results for the target protein DNA Gyrase subunit B showed that (-)-epicatechin, (+)-catechin, and rutin had the best docking scores compared to the native ligand benzothiazole. Hexahydrocurcumin had the best docking score for the target protein dihydrofolate reductase with the native ligand trimethoprim. The results of docking simulation with PBP 2X target protein with native ligand cefepime showed the best docking score which were rutin, morin, and (-)-epicatechin. The results of docking simulations with the target protein 30s ribosome with native ligand streptomycin showed the best docking score were anthocyanin, apigenin, and quercetin. The ADMET prediction results showed that that all compounds had good GI absorption except rutin. Anthocyanin compound could be distributed to the BBB. Some compounds acted as CYP inhibitors and P-gp substrates. Total clearance of compounds ranged from -0.369 to 0.716 and none acted as Renal OCT2 substrate. Predicted mutagenic toxicity were anthocyanin and quercetin, and toxicity classes of hit compounds were in the range of class 3 to 6. From the above results, the active compounds of red ginger showed potential in 4 antibacterial mechanisms of action.

Keyword: Red Ginger, molecular docking, antibacterial, ADMET