

**Optimasi dan Karakterisasi Bioaktif Antiinflamasi, Antioksidan,
Antidiabetik Serta Studi *In Silico* Bakteri Laut
Bacillus valezensis Simbion Sponge *Angelas Sp*
dari Pulau Oenggae, NTT**



**PRODI ILMU BIOMEDIS PROGRAM SARJANA
FAKULTAS KEDOKTERAN
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG 2025**

ABSTRACT

Optimization and Characterization of Anti-Inflammatory, Antioxidant, Antidiabetic Bioactive Activities and in Silico Studies of Marine Bacteria *Bacillus valezensis* Symbiont Sponge *Angelas sp* from Oenggae Island, NTT

By

Amanda Nabilah Fitriani, Linosefa, Apon Zaenal Mustopa, Eti Yerizel, Netti Suharti, Biomechy Oktomalia Putri

*The development and discovery of organic compounds that have new therapeutic agents have directed attention to bioactive compounds derived from bacteria associated with sponges. This study aims to explore the potential of secondary metabolites in *Bacillus valezensis*, a marine symbiotic bacteria of *Angelas sp* sponge isolated from Oenggae Island, East Nusa Tenggara (NTT) whose potential as anti-inflammatory, antioxidant, and antidiabetic has not been reported.*

*This study used in vitro and in silico methods using a series of tests: Growth optimization, protein denaturation for anti-inflammatory, DPPH (2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl) for antioxidant evaluation, inhibition of α -glucosidase enzyme for antidiabetic testing, then validated in silico. This study used ethyl acetate extract obtained from a potential strain identified by molecular techniques as the *Bacillus valezensis* strain NRRL B-41580. Statistical data analysis of this study used Microsoft Excel software.*

**Bacillus valezensis* strain NRRL B-41580 grows ideally in an environment of temperature 25°C, pH 7, 5% NaCl salinity and incubation time of 24 hours showing the best results with an inhibition level of anti-inflammatory activity of 53.42 ± 0.002% at 25 ppm, antioxidant activity of 76.05 ± 0.02% at 500 ppm, and antidiabetic activity of 52.34 ± 0.01% at 25 ppm. In silico results showed three promising compounds, namely Amyl cyclopentenone as an antioxidant, 1,3,5-Triazine, 2,4,6-tris(cyanomethoxy)- as an antidiabetic, and (4,6-Dimethylpyrimidine-2-yl)(5-methyl-4H-[1,2,4]triazol-3-yl)amine as an anti-inflammatory that show high binding affinity to their respective therapeutic targets. *Bacillus valezensis* strain NRRL B-41580 as a source of bioactive compounds shows strong potential as a promising candidate for the development of new treatments. Further research is recommended to conduct phytochemical tests to identify the class of these compounds.*

Keywords: Molecular Docking, Biotherapeutics, Amyl cyclopentenone, 1,3,5-Triazine, 2,4,6-tris(cyanomethoxy)-, (4,6-Dimethylpyrimidin-2-yl)(5-methyl-4H-[1,2,4]triazol-3-yl)amine

ABSTRAK

Optimasi dan Karakterisasi Bioaktif Antiinflamasi, Antioksidan, Antidiabetik Dan Studi *in Silico* Bakteri Laut *Bacillus valezensis* Simbion Sponge *Angelas sp* dari Pulau Oenggae, NTT

Oleh

Amanda Nabilah Fitriani, Linosefa, Apon Zaenal Mustopa, Eti Yerizel, Netti Suharti, Biomechy Oktomalio Putri

Pengembangan dan penemuan senyawa organik yang memiliki agen terapeutik baru telah mengarahkan perhatian pada senyawa bioaktif yang berasal dari bakteri yang berasosiasi dengan spons. Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi potensi metabolit sekunder pada *Bacillus valezensis*, bakteri laut simbion sponge *Angelas sp* yang diisolasi dari Pulau Oenggae, Nusa Tenggara Timur (NTT) yang belum dilaporkan potensinya sebagai antiinflamasi, antioksidan, dan antidiabetes.

Penelitian ini menggunakan metode *in vitro* dan *in silico* dengan menggunakan serangkaian pengujian: Optimasi pertumbuhan, denaturasi protein untuk antiinflamasi, DPPH (*2,2-difenil-1-picrylhydrazyl*) untuk evaluasi antioksidan, inhibisi enzim α -glukosidase untuk pengujian antidiabetes, kemudian divalidasi secara *in silico*. Penelitian ini menggunakan ekstrak etil asetat yang diperoleh dari galur yang menjanjikan yang teridentifikasi secara teknik molekuler sebagai *Bacillus valezensis* strain NRRL B-41580. Analisis data statistik penelitian ini menggunakan perangkat lunak Microsoft Excel.

Bacillus valezensis strain NRRL B-41580 tumbuh ideal pada lingkungan suhu 25°C, pH 7, salinitas NaCl 5% dan waktu inkubasi 24 jam menunjukkan hasil yang paling bagus dengan tingkat penghambatan aktivitas antiinflamasi sebesar $53,42 \pm 0,002\%$ pada 25 ppm, aktivitas antioksidan sebesar $76,05 \pm 0,02\%$ pada 500 ppm, dan aktivitas antidiabetik sebesar $52,34 \pm 0,01\%$ pada 25 ppm. Hasil *in silico* terdapat tiga senyawa yang menjanjikan yaitu *Amyl cyclopentenone* pada antioksidan, *1,3,5-Triazine, 2,4,6-tris(cyanomethoxy)-* pada antidiabetik, dan *(4,6-Dimethylpyrimidin-2-yl)(5-methyl-4H-[1,2,4]triazol-3-yl)amine* pada antiinflamasi yang menunjukkan afinitas pengikatan yang tinggi terhadap target terapeutik masing-masing. *Bacillus valezensis* strain NRRL B-41580 sebagai sumber senyawa bioaktif menunjukkan potensi yang kuat sebagai kandidat yang menjanjikan untuk pengembangan pengobatan baru. Penelitian lebih lanjut disarankan uji fitokimia untuk mengidentifikasi golongan dari senyawa.

Kata Kunci: Molekuler Docking, Bioterapi, *Amyl cyclopentenone*, *1,3,5-Triazine, 2,4,6-tris(cyanomethoxy)-*, *(4,6-Dimethylpyrimidin-2-yl)(5-methyl-4H-[1,2,4]triazol-3-yl)amin*