

ABSTRAK

Nama : Dhea Novita Sari
Program Studi : Farmasi
Judul : Penambatan Molekuler Senyawa Aktif Daun Pucuk Merah
(*Syzygium myrtifolium* Walp.) Sebagai Inhibitor Sintetase
Pantotenat Pada *Staphylococcus aureus*.

Daun pucuk merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) merupakan tanaman hias yang cukup populer di Indonesia. Senyawa aktif daun pucuk merah berpotensi sebagai antibakteri menghambat bakteri Gram positif, salah satunya adalah *Staphylococcus aureus*. *Staphylococcus aureus* merupakan bakteri penyebab penyakit infeksi yang umum ditemukan pada manusia. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui jenis senyawa aktif daun pucuk merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) yang memiliki potensi sebagai antibakteri terhadap protein pantothenate synthetase pada *Staphylococcus aureus* dengan pembandingan antibiotik amoksisilin dan sefazolin menggunakan program YASARA, PLANTS, MarvinSketch, Discovery Studio Visualizer, SwissADME, pkCSM dan PASSonline. Hasil penelitian ini didapatkan tiga senyawa aktif yang berpotensi sebagai kandidat obat dalam menghambat protein pantothenate synthetase pada *Staphylococcus aureus* karena memiliki nilai skor docking yang melebihi native ligan dan obat pembandingan yaitu senyawa copetin dengan skor docking -113,115, Di-n-2-propylpentylphthalate dengan skor docking -85,279, dan luteolin dengan skor docking -83,990. Sifat farmakokinetik dan toksisitas (ADMET) pada senyawa luteolin pada daun pucuk merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) memiliki absorpsi yang baik, dapat didistribusikan dengan cukup baik, hanya dimetabolisme pada CYP3A4, dapat diekresi dari tubuh dan toksisitas yang relatif rendah.

Kata kunci:

Syzygium myrtifolium Walp., *Staphylococcus aureus*, sintetase pantotenat, penambatan molekuler.

ABSTRACT

Nama : Dhea Novita Sari
Program Studi : Farmasi
Judul : Molecular Docking Active Compounds of Pucuk Merah Leaves
(*Syzygium myrtifolium* Walp.) As *Pantothenate Synthetase*
Inhibitors in *Staphylococcus aureus*.

Red shoots (*Syzygium myrtifolium* Walp.) is an ornamental plant that is quite popular in Indonesia. The active compound of red shoot leaves has the potential as an antibacterial to inhibit gram-positive bacteria, one of which is *Staphylococcus aureus*. *Staphylococcus aureus* is a bacterium that causes infectious diseases commonly found in humans. This study aims to determine the type of active compound of red shoots (*Syzygium myrtifolium* Walp.) which has potential as an antibacterial against pantothenate synthetase protein in *Staphylococcus aureus* in comparison with amoxicillin and cefazolin antibiotics using the YASARA, PLANTS, MarvinSketch, Discovery Studio Visualizer, SwissADME, pkCSM and PASSOnline program. The results of this study revealed three active compounds that have the potential as drug candidates in inhibiting protein pantothenate synthetase in *Staphylococcus aureus* because they have a docking score that exceeds the native ligand and the comparator drug, namely copetin with a docking score of -113.115, Di-n-2-propylpentylphthalate with a docking score of -113.115, Di-n-2-propylpentylphthalate with a docking score of docking -85.279, and luteolin with a docking score of -83.990. The pharmacokinetic and toxicity properties (ADMET) of luteolin compounds in red shoot leaves (*Syzygium myrtifolium* Walp.) have good absorption, can be distributed quite well, only metabolized at CYP3A4, can be excreted from the body and relatively low toxicity.

Keywords:

Syzygium myrtifolium Walp., *Staphylococcus aureus*, *pantothenate synthetase*, molecular docking.