

LEMBAR PENGESAHAN

**PENAMBATAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA DARI
KULIT BUAH NAGA (*Hylocereus polyrhizus*) TERHADAP NADH- DEPENDENT
ENOYL-ACP REDUCTASE (INHA) SEBAGAI ANTITUBERKULOSIS**

Skripsi

Diajukan untuk memenuhi persyaratan kelulusan Sarjana Farmasi

Sarah Stefanie Wijaya

11181099

Bandung, 30 Agustus 2022

Menyetujui,

Pembimbing Utama,



(Anne Yuliantini, M.Si.)

NIDN. 0411059101

Pembimbing Serta,



(Apt. Purwaniati, M.Si.)

NIDN. 0403018206

ABSTRAK

**PENAMBATAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA DARI
KULIT BUAH NAGA (*Hylocereus polyrhizus*) TERHADAP NADH- DEPENDENT
ENOYL-ACP REDUCTASE (INHA) SEBAGAI ANTITUBERKULOSIS**

Oleh :

Sarah Stefanie Wijaya

11181099

TBC merupakan penyakit infeksi menular yang diakibatkan oleh bakteri MTB (*H37Rv*), dapat menginfeksi pada organ manusia seperti organ paru-paru, tulang, otak. Mengacu pada WHO global TB Report tahun 2020, 10 juta orang di dunia menderita TBC serta mengakibatkan sebanyak 1,2 juta orang meninggal dalam satu tahunnya. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan serta mendapatkan senyawa penuntun (*lead compound*) yang aktif menghambat enzim *InhA* sebagai antituberkulosis. Metode yang digunakan pada penelitian ini meliputi metode penambatan molekul, simulasi dinamika molekul, analisis *MMGBSA*. Tahapan yang dilakukan meliputi persiapan ligan, optimasi geometri, persiapan protein target, validasi metode penambatan molekul, simulasi penambatan molekul ligan uji, simulasi dinamika molekul. Simulasi penambatan molekul terhadap 29 senyawa uji, diperoleh hasil 6 senyawa terbaik dengan kode ligan AAM, STI, ERG, BSI, BAM, dan CAM yang dilakukan ke tahap simulasi dinamika molekul. Hasil terbaik dengan nilai energi ikatan lebih negatif dari ligan pembanding didapatkan pada ligan STI (*Stigmasterol*).

Kata Kunci : Tuberkulosis, Dinamika Molekul, Enzim NADH, Penambatan Molekul, Senyawa Kimia Kulit Buah Naga