

**ABSTRACT****DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF COMPOUND  
FROM DRAGONS FRUIT (*Hylocereus polyrhizus*) AGAINST NADH-  
DEPENDENT ENOYL-ACP REDUCTASE (INH A) AS ANTITUBERCULOSIS****By:****Sarah Stefanie Wijaya****11181099**

*TB is an infectious infectious disease caused by MTB bacteria (H37Rv), which can infect human organs such as lungs, bones, brain. Referring to the WHO global TB Report 2020, 10 million people in the world suffer from TB and it causes 1.2 million people to die in one year. This study aims to determine and obtain a lead compound that is active in inhibiting the InhA enzyme as an antituberculosis. The methods used in this study include docking, molecular dynamics simulation, MMGBSA analysis. The steps involved include ligand preparation, geometry optimization, target protein preparation, docking validation, test ligand molecular docking simulation, molecular dynamics simulation. Docking simulation of 29 test compounds, obtained the results of the best 6 compounds with ligand codes AAM, STI, ERG, BSI, BAM, and CAM which were carried out to the molecular dynamics simulation stage. The best results with more negative bond energy values than the comparison ligand were obtained on the STI ligand (Stigmasterol).*

*Keywords: Tuberculosis, Molecular Dynamics, NADH Enzyme, Docking, Chemical Compounds of Dragon Fruit Skin*

## KATA PENGANTAR

Puji syukur saya panjatkan kehadirat Tuhan Yang Maha Esa karena dengan rahmat, dan kasih karunia, serta penyertaan-Nya saya dapat menyelesaikan Tugas Akhir ini sebatas pengetahuan dan kemampuan yang dimiliki. Tugas akhir ini dapat diselesaikan tidak terlepas dari dukungan berbagai pihak. Penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Orang tua serta kakak terkasih Stefanus Wijaya yang selalu memberikan dukungan melalui doa, serta motivasi yang tak terhingga, Chrystania dan Verrent sebagai adik yang selalu membantu dalam proses perkuliahan.
2. Ibu Anne Yulianti, M. Si selaku pembimbing utama yang telah membimbing dengan sabar, memberikan saran dan masukan selama penelitian dan penyusunan tugas akhir ini.
3. Ibu apt. Purwaniati, M. Si selaku pembimbing serta yang telah membimbing, memberikan saran dan masukan selama penelitian dan penyusunan tugas akhir ini.
4. Semua Rekan KK Analisis Farmasi dan Kimia Medisinal, terkhususnya tim Kimia Medisinal yang sudah berjuang sama-sama untuk menyelesaikan penelitian ini.
5. Teman-teman S1 Farmasi Angkatan 2018 yang banyak memberikan dukungan semangat.
6. Teman dari kecil Jessica Gwyneth Patiung, dan Destah Rahel yang selalu memberikan dukungan lewat doa.

Saya sangat berharap Tugas Akhir ini dapat berguna dalam rangka menambah wawasan serta pengetahuan mengenai pentingnya pengobatan Tuberkulosis dan aplikasi yang digunakan dalam penambatan dan simulasi MD pada bidang kimia medisinal. Saya juga menyadari sepenuhnya bahwa didalam pengerjaan tugas akhir ini terdapat kekurangan-kekurangan dan jauh dari yang masih diharapkan. Untuk itu saya sangat berharap adanya saran dan masukan demi perbaikan di masa yang mendatang, mengingat tidak ada sesuatu yang sempurna tanpa saran yang membangun.

Bandung, 30 Juli 2022



Sarah Stefanie Wijaya

NPM: 11181099