

Aktivitas Antibakteri Senyawa Flavonoid Buah Merah (*Pandanus Conoideus Lam.*) terhadap Enzim Muramidase A Dan Glucosyltransferase P *Streptococcus sanguinis* secara *In Silico*

**Andi Sri Permatasari
160421190007**

ABSTRAK

Buah merah (*Pandanus conoideus Lam.*) merupakan tanaman asli dari Papua, Indonesia. Senyawa flavonoid buah merah memiliki aktivitas antibakteri. *Streptococcus sanguinis* merupakan bakteri gram-positif dalam rongga mulut yang menjadi pionir dalam pembentukan biofilm. Dinding sel tersusun oleh peptidoglikan yang tebal. Muramidase A (*murA*) adalah enzim berperan pada biosintesis peptidoglikan. *Streptococcus sanguinis* memiliki glucosyltransferase P (*gtfP*) yang menghasilkan glukon pada pembentukan biofilm. *MurA* dan *gtfP* dapat dijadikan target antibakteri. Tujuan penelitian adalah untuk menganalisis aktivitas antibakteri senyawa flavonoid buah merah (*Pandanus conoideus Lam.*) terhadap muramidase A dan glucosyltransferase P pada *Streptococcus sanguinis* secara *in silico*.

Penelitian menggunakan metode *molecular docking* secara *in silico* untuk melihat aktivitas antibakteri antara senyawa empat senyawa flavonoid buah merah (*quercetin*, *quercetin 3 methyl ether*, *quercetin 3 glucoside*, dan *taxifolin*) terhadap *murA* (1AIU) dan *gtfP* (3AIE) menggunakan *software Autodock Tools*.

Aktivitas antibakteri dilihat dari nilai *binding affinity* dan *Ki* (Konstanta inhibisi). *Quercetin 3 glucoside* menunjukkan nilai *binding affinity* dan *Ki* paling kecil terhadap *murA* dibandingkan ketiga senyawa flavonoid lain dan klorheksidin, yaitu -11.11 kcal/mol dan 0.007 μ M. *Binding affinity* dan *Ki* *Quercetin 3 glucoside* juga menunjukkan nilai paling kecil terhadap *gtfP* dibandingkan ketiga senyawa flavonoid lain, yaitu -5.96 kcal/mol dan 42.50 μ M. Klorheksidin sebagai kontrol positif menunjukkan nilai paling kecil.

Simpulan dalam penelitian adalah senyawa flavonoid pada buah merah memiliki aktivitas antibakteri terhadap *murA* dan *gtfP* pada *Streptococcus sanguinis*. *Quercetin 3 glucoside* merupakan senyawa yang paling baik dalam menghambat *murA* dan *gtfP*.

Kata kunci: flavonoid, buah merah, muramidase A, glucosyltransferase P, *Streptococcus sanguinis*, *in silico*

Antibacterial Activity of Red Fruit Flavonoids (Pandanus Conoideus Lam.) Against Muramidase A and Glucosyltransferase P Streptococcus Sanguinis In Silico

**Andi Sri Permatasari
160421190007**

ABSTRACT

Red fruit (Pandanus conoideus Lam.) is a native plant from Papua, Indonesia. Flavonoids of red fruit flavonoid have antibacterial activity. Streptococcus sanguinis is a gram-positive bacteria in the oral cavity which is a pioneer in the formation of biofilms. The cell wall is composed of thick peptidoglycan. Muramidase A (murA) is an enzyme that plays a role in peptidoglycan biosynthesis. Streptococcus sanguinis has glucosyltransferase P (gtfP) which produces glucans on biofilm formation. MurA and gtfP can be used as target of antibacterial. The aim of this research was to analysis the antibacterial activity of red fruit flavonoids (Pandanus conoideus Lam.) against muramidase A and glucosyltransferase P in Streptococcus sanguinis in silico.

This study used the in silico molecular docking method to see the antibacterial activity of four red fruit flavonoid compounds (Quercetin, Quercetin 3 methyl ether, Quercetin 3 glucoside, and Taxifolin) against murA (1AIU) and gtfP (3AIE) using Autodock Tools software.

Antibacterial activity was seen from the value of binding affinity and Ki (inhibition constant). Quercetin 3 glucoside showed the lowest binding affinity and Ki values for murA compared to the three other flavonoid compounds and chlorhexidine, are -11.11 kcal/mol and 0.007 μ M. Binding affinity and Ki of quercetin 3 glucoside also showed the lowest values for gtfP compared to the other three flavonoid compounds, are -5.96 kcal/mol and 42.50 μ M. Chlorhexidine showed a smallest value.

The conclusions is flavonoids in red fruit have antibacterial activity against murA and gtfP in Streptococcus sanguinis. Quercetin 3 glucoside is the best compound in inhibiting murA and gtfP.

Keywords: flavonoid, red fruit, muramidase A, glucosyltransferase P, Streptococcus sanguinis, in silico