

ABSTRAK

ADE WINA UTARI SUHERMAN. 2023. **Analisis *In Silico*: Aktivitas Senyawa Antibakteri dalam *Zingiber aromaticum* Terhadap *Salmonella typhi* sebagai Sumber Belajar Biologi pada Konsep Materi Bakteri.** Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Demam tifoid merupakan penyakit infeksi akut pada usus halus yang disebabkan oleh *Salmonella typhi*. Prevelensi demam tifoid di dunia terdapat kasus sebanyak 27 juta per tahun dan menyebabkan 200.000 kematian. Di Indonesia, diperkirakan sekitar 148,7 per 100.000 orang per tahun. Pengobatan menggunakan antibiotik ciprofloxacin ditemukan adanya resistensi bakteri sehingga penemuan bahan herbal sebagai alternatifnya masih terus dikembangkan seperti *Zingiber aromaticum*. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi fisikokimia, farmakokinetik, *binding affinity*, dan tingkat toksisitas senyawa *Zingiber aromaticum* yaitu *isokaempferide*, (*S*)-6-Gingerol, (-)-beta-Sitosterol, *afzelin*, *kaempferol 3-(3''-acetylramnoside)*, *zerumbone*, *3-O-beta-D-glucopyranosyl sitosterol*, *tricyclohumuladiol*, *trans-10-Shogaol*, *trans-6-Shogaol*, *zerumbone epoxide*, (*S*)-10-Gingerol, (*S*)-8-Gingerol, dan *2,9-Humuladien-6-ol-8-one* yang didapat dari KNApSAcK. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah *molecular docking* untuk membandingkan kemampuan senyawa *Zingiber aromaticum* dengan pembanding ciprofloxacin. Hasilnya semua senyawa aktif *Zingiber aromaticum* memenuhi profil fisikokimia yaitu diprediksi menjadi kandidat obat karena memenuhi parameter *Lipinski's rule of five*. Senyawa *zerumbone*, dan *zerumbone epoxide* memiliki profil farmakokinetik paling baik dibandingkan ciprofloxacin. Senyawa *isokaempferide*, *afzelin*, *kaempferol 3-(3''-acetylramnoside)*, *zerumbone*, *zerumbone epoxide*, *3-O-beta-D-Glucopyranosyl sitosterol*, *tricyclohumuladiol*, dan *2,9-Humuladien-6-ol-8-one* relatif lebih aman, tidak bersifat mutagen serta tidak bersifat toksik terhadap hepar dibandingkan ciprofloxacin. Senyawa yang paling valid dibandingkan ciprofloxacin adalah (-)-beta-Sitosterol dengan *binding affinity* -8,5 serta RMSD l.b 1,513 dan RMSD u.b 2,169. Luaran penelitian ini yaitu *booklet* sebagai sumber belajar biologi pada materi bakteri untuk kelas 10 untuk KD 3.5 dan KD 4.5.

Kata Kunci: (-)-beta-Sitosterol, *Salmonella typhi*, *Zerumbone*, *Zerumbone epoxide*, *Zingiber aromaticum*

ABSTRACT

ADE WINA UTARI SUHERMAN. 2023. *In Silico Analysis: Activity Of Antibacterial Compounds In Zingiber aromaticum Against Salmonella typhi As A Biological Study Resource In The Concept Of Bacterial Materials*. Biology Education Department, Faculty of Science and Teacher's Training, Siliwangi University of Tasikmalaya.

Typhoid fever is an acute infectious disease of the small intestine caused by *Salmonella typhi*. The prevalence of typhoid fever in the world is 27 million cases per year and causes 200,000 deaths. In Indonesia, it is estimated to be around 148.7 per 100,000 people per year. Treatment using ciprofloxacin antibiotics was found to have bacterial resistance so that the discovery of alternative herbal ingredients is still being developed such as *Zingiber aromaticum*. This study aims to predict the physicochemistry, pharmacokinetics, binding affinity, and level of toxicity of *Zingiber aromaticum* compounds, namely isokaempferide, (S)-6-Gingerol, (-)-beta-Sitosterol, afzelin, kaempferol 3-(3''-acetylramnoside), zerumbone, 3-O-beta-D-glucopyranosyl sitosterol, tricyclohumuladiol, trans-10-Shogaol, trans-6-Shogaol, zerumbone epoxide, (S)-10-Gingerol, (S)-8-Gingerol, and 2,9-Humuladien-6-ol-8-one from KNApSAcK. The method used molecular docking to compare the ability of the compound *Zingiber aromaticum* with ciprofloxacin as a comparison. As a result, all active compounds of *Zingiber aromaticum* fulfil the physicochemical profile, which is predicted to be drug candidates because they fulfil the parameters of Lipinski's rule of five. Zerumbone and zerumbone epoxide compounds have the best pharmacokinetic profile compared to ciprofloxacin. The compounds isokaempferide, afzelin, kaempferol 3-(3''-acetylramnoside), zerumbone, zerumbone epoxide, 3-O-beta-D-Glucopyranosyl sitosterol, tricyclohumuladiol, and 2,9-Humuladien-6-ol-8-one are relatively safer, not mutagenic and not toxic to the liver compared to ciprofloxacin. The most valid compounds compared to ciprofloxacin are (-)-beta-sitosterol with a binding affinity of -8.5 and RMSD l.b 1.513 and RMSD u.b 2.169. The output of this research is booklets as a source of learning biology on bacteria for grade 10 for KD 3.5 and KD 4.5.

Keywords: (-)-beta-Sitosterol, *Salmonella typhi*, Zerumbone, Zerumbone epoxide, *Zingiber aromaticum*