

VIRTUAL SCREENING SENYAWA ANTI-MRSA (*Methicillin Resistant Staphylococcus aureus*) DARI *streptomyces* DENGAN METODE DOCKING MOLEKUL

Agung Laksono, K1A016053, Kimia, FMIPA, Universitas Jenderal Soedirman Jl. Dr. Soeparno Utara 61
Grendeng Purwokerto, 53122-Telp/Fax 0821-638793 Email ; fmipa@unsoed.ac.id Laman :
<http://fmipa.unsoed.ac.id>

ABSTRAK

Methicillin Resistant Staphylococcus aureus (MRSA) merupakan bakteri penyebab utama infeksi nosokomial di seluruh rumah sakit di dunia. Saat ini, terapi infeksi MRSA menggunakan *ceftaroline* telah dilaporkan adanya resistensi. Untuk mengatasi resistensi tersebut maka eksplorasi senyawa antibiotik baru sebagai anti-MRSA menjadi penting dilakukan. Salah satu pendekatan *virtual screening* senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai obat baru adalah menggunakan metode *docking* molekul. Sumber senyawa bioaktif yang potensial umumnya berasal dari genus *streptomyces* yang merupakan bakteri utama penghasil antibiotik. Berdasarkan hal tersebut maka tujuan penelitian adalah membandingkan interaksi protein PBP2a dengan PBP2a mutan terhadap *ceftaroline*, serta *screening* senyawa bioaktif dari *streptomyces* sebagai kandidat anti-MRSA. Preparasi ligan menggunakan *software Marvin*, *docking* molekul menggunakan *software autodock4*, dan visualisasi hasil *docking* menggunakan *software Discovery Studio*. Hasil pensejajaran menunjukkan bahwa PBP2a mutan memiliki urutan asam amino yang lebih panjang (643 asam amino) dibandingkan PBP2a (641 asam amino). Pensejajaran PBP2a dan PBP2a mutan menunjukkan perbedaan urutan asam amino pada Rantai A dan rantai B. Mutasi yang terjadi pada PBP2a mutan menyebabkan perubahan konformasi pada sisi aktif PBP2a mutan sehingga interaksi antara *ceftaroline* dan PBP2a mutan menjadi berkurang. Hasil *virtual screening* menunjukkan bahwa 1-acetyl- β -carboline merupakan senyawa yang paling potensial sebagai anti-MRSA dengan energi ikatan paling kuat yaitu -7,12 KKal/mol. Asam amino yang terlibat pada pengikatan senyawa bioaktif dengan PBP2a mutan adalah serin, treonin, asparagin, tirosin dan alanin.

Kata kunci: anti-MRSA, *Streptomyces*, *docking* molekul

VIRTUAL SCREENING SENYAWA ANTI-MRSA (*Methicillin Resistant Staphylococcus aureus*) DARI *streptomyces* DENGAN METODE DOCKING MOLEKUL

Agung Laksono, K1A016053, Kimia, FMIPA, Universitas Jenderal Soedirman Jl. Dr. Soeparno Utara 61
Grendeng Purwokerto, 53122-Telp/Fax 0821-638793 Email ; fmipa@unsoed.ac.id Laman :
<http://fmipa.unsoed.ac.id>

ABSTRACT

Methicillin Resistant Staphylococcus aureus (MRSA) is the main cause of nosocomial infections in all hospitals in the world. At present, MRSA infection therapy using ceftaroline has been reported for resistance. To overcome this resistance, the exploration of new antibiotic compounds as anti-MRSA becomes important. One approach to virtual screening of potential bioactive compounds as new drugs is to use molecular docking methods. Potential sources of bioactive compounds generally come from the genus Streptomyces which is the main bacterium producing antibiotics. Based on this, the purpose of this study is to compare the interaction of PBP2a with PBP2a with ceftaroline, and screening of bioactive compounds from streptomyces as anti-MRSA candidates. Ligand preparation using Marvin software, molecular docking using autodock4 software, and visualization of docking results using Discovery Studio software. Alignment results show that PBP2a mutants have a longer amino acid sequence (643 amino acids) than PBP2a (641 amino acids). The mutation of PBP2a and PBP2a mutants shows the different amino acid sequences in Chain A and chain B. Mutations that occur in mutant PBP2a cause conformational changes on the active side of PBP2a mutants so that the interaction between ceftaroline and PBP2a mutants is reduced. Virtual screening results show that 1-acetyl- β -carboline is the most potential compound as an anti-MRSA with the strongest bond energy, -7.12 KCal/mol. Amino acids involved in binding of bioactive compounds with mutant PBP2a are serine, threonine, asparagine, tyrosine and alanine.

Keywords: *Anti-MRSA, Streptomyces, Molecular Docking*