

Abstrak

POTENSI SENYAWA BIOAKTIF DAUN KUMIS KUCING (*Orthosiphon Stamineus*) SEBAGAI INHIBITOR PROTEIN ADHESIN FIMH UROPATHOGENIC *ESCHERICHIA COLI* (UPEC) SECARA *IN SILICO*

Nike Kholizatin Devani, Eka Prasasti Nur Rachmani, Nahrul Hasan

Latar Belakang: Infeksi saluran kemih (ISK) merupakan masalah kesehatan yang banyak terjadi dengan *Uropathogenic Escherichia coli* (UPEC) sebagai penyebab utama. Proses adhesi bakteri pada sel uroepitel yang dimediasi oleh protein adhesin FimH merupakan tahap awal dan krusial dalam patogenesis ISK. Daun kumis kucing (*Orthosiphon stamineus*) dilaporkan memiliki aktivitas antiadhesi terhadap UPEC. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa bioaktif daun kumis kucing sebagai kandidat inhibitor protein adhesin FimH UPEC secara *in silico*.

Metodologi: Penelitian ini dilakukan secara *in silico* menggunakan analisis ADMET, *molecular docking* dan *molecular dynamics*. Sebanyak 104 senyawa bioaktif daun kumis kucing diseleksi berdasarkan aturan Lipinski dan prediksi ADMET. Protein target yang digunakan adalah FimH (PDB ID: 4X5P). Parameter yang dianalisis meliputi energi ikatan serta kestabilan kompleks berdasarkan nilai RMSD dan RMSF.

Hasil Penelitian: Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa asam maslinat merupakan senyawa terbaik sebagai inhibitor protein adhesin FimH dengan nilai binding affinity $-7,6$ kcal/mol serta menunjukkan kestabilan kompleks yang baik berdasarkan simulasi *molecular dynamics* dengan nilai RMSD $1,384$ Å dan RMSF $< 2,5$ Å pada residu kunci.

Kesimpulan: Asam maslinat merupakan inhibitor FimH terbaik secara *in silico* dibanding senyawa uji lain dengan *binding affinity* $-7,6$ kcal/mol dan kompleks stabil.

Kata kunci: *Orthosiphon stamineus*, FimH, *molecular docking*, *molecular dynamics*

Abstract

POTENSI SENYAWA BIOAKTIF DAUN KUMIS KUCING (*Orthosiphon Stamineus*) SEBAGAI INHIBITOR PROTEIN ADHESIN FIMH UROPATHOGENIC *ESCHERICHIA COLI* (UPEC) SECARA *IN SILICO*

Nike Kholizatin Devani, Eka Prasasti Nur Rachmani, Nahrul Hasan

Background: Urinary tract infection (UTI) is a common health problem caused mainly by *Uropathogenic Escherichia coli* (UPEC). Bacterial adhesion mediated by the FimH adhesin protein is a crucial early stage in UTI pathogenesis. Cat's whiskers leaves (*Orthosiphon stamineus*) have been reported to exhibit antiadhesive activity against UPEC. This study aimed to evaluate the potential of bioactive compounds from cat's whiskers leaves as inhibitors of the FimH adhesin protein *in silico*.

Methods: This study was conducted *in silico* using ADMET analysis, molecular docking and molecular dynamics. A total of 104 bioactive compounds from cat's whiskers leaves were screened based on Lipinski's rule and ADMET prediction. The target protein used was FimH (PDB ID: 4X5P). Parameters analyzed included binding energy and complex stability based on RMSD and RMSF values.

Results: Molecular docking showed that maslinic acid was the best inhibitor of FimH with a binding affinity of -7.6 kcal/mol. Molecular dynamics simulation demonstrated a stable complex with an RMSD value of 1.384 Å and RMSF values below 2.5 Å at key residues.

Conclusion: Maslinic acid is the best candidate inhibitor of FimH *in silico* with a binding affinity of -7.6 kcal/mol and a stable complex.

Keywords: *Orthosiphon stamineus*, FimH, molecular docking, molecular dynamics