

Studi QSAR dan Desain Surfaktan Gemini Kationik sebagai Senyawa Antimikroba terhadap *Escherichia coli* dan *Candida albicans*

ELY SETIAWAN

17/420346/SPA/00615

INTISARI

Penelitian tentang studi QSAR dan desain surfaktan gemini kationik sebagai senyawa antimikroba terhadap *Escherichia coli* dan *Candida albicans* telah dilakukan. Pada penelitian ini dilakukan penyusunan model QSAR yang valid antara molekul-molekul senyawa surfaktan gemini amonium kuarterner dan surfaktan gemini imidazolium melalui deskriptor dengan aktivitas antibakteri terhadap *E. coli* dan antijamur terhadap *C. albicans*. Model tersebut kemudian digunakan sebagai penuntun dalam merancang senyawa baru dan alat untuk memprediksi aktivitas antimikrobanya. Selanjutnya dilakukan kajian interaksi dengan *docking* molekul.

Persamaan QSAR untuk pemodelan aktivitas antimikroba surfaktan gemini amonium kuarterner terhadap *E. coli* dan *C. albicans* adalah:

$$\text{pMIC}_{\text{EC}} = 0,211 \text{ AATS5m} - 12,854 \text{ MATS8m} + 0,210 \text{ PNSA3} \\ + 5,452 \text{ IC5} - 18,136 \text{ AMID_N} - 20,435$$

$$\text{pMIC}_{\text{CA}} = -0,002 \text{ ATSC4Z} + 38,440 \text{ MATS4c} + 1,174 \text{ GATS8s} \\ - 4,089 \text{ MINssCH2} + 4,268 \text{ IC5} + 1,288 \text{ Mor23p} - 16,690$$

Persamaan QSAR untuk pemodelan aktivitas antimikroba surfaktan gemini imidazolium terhadap *E. coli* dan *C. albicans* adalah:

$$\text{pMIC}_{\text{EC}} = 0,022 \text{ ATSC4Z} - 0,082 \text{ ATSC4i} + 4,526 \text{ IC5} + 3,942 \text{ Mor13m} \\ + 6,168 \text{ Mor15v} - 3,168 \text{ Mor24se} - 20,291$$

$$\text{pMIC}_{\text{CA}} = -2,768 \text{ AATS8s} - 1,133 \text{ MATS8i} + 3,132 \text{ IC4} + 2,024 \text{ Mor11p} \\ - 6,994$$

Desain senyawa baru dari surfaktan gemini amonium kuarterner dan surfaktan gemini imidazolium telah dibuat dan diprediksi aktivitas antimikroba terhadap *E. coli* dan *C. albicans*. Rancangan terbaik surfaktan gemini kationik sebagai antibakteri terhadap *E. coli* adalah senyawa GQAS-19 dan GIS-32 dengan aktivitas antibakteri pMIC sebesar 7,425 dan 8,982, dan sebagai antijamur terhadap *C. albicans* adalah GQAS-22 dan GIS-35 dengan nilai aktivitas antijamur pMIC sebesar 11,482 dan 8,002. Kajian interaksi menggunakan *docking* molekul menunjukkan bahwa senyawa usulan GQAS-19, GQAS-22, GIS-32 dan GIS-35 memiliki aktivitas antimikroba yang lebih rendah dibandingkan dengan ligan ko-kristal.

Kata kunci: aktivitas antimikroba, *docking* molekul, QSAR, surfaktan gemini kationik, surfaktan gemini amonium kuarterner, surfaktan gemini imidazolium

**QSAR Study and Design of Gemini Cationic Surfactants
as Antimicrobial Agents Against *Escherichia coli* and *Candida albicans***

ELY SETIAWAN

17/420346/SPA/00615

ABSTRACT

Research on QSAR studies and the design of cationic gemini surfactant as an antimicrobial compound against *Escherichia coli* and *Candida albicans* has been carried out. In this study, a valid QSAR model was developed between the molecules of quaternary ammonium gemini surfactant and gemini imidazolium surfactant compounds through descriptors with antibacterial activity against *E. coli* and antifungal activity against *C. albicans*. The model is then used as a guide in designing new compounds and as a tool to predict their antimicrobial activity. Next, an interaction study was carried out using molecular docking.

The QSAR equation for modeling the antimicrobial activity of quaternary ammonium gemini surfactant against *E. coli* and *C. albicans* is:

$$\text{pMIC}_{\text{EC}} = 0,211 \text{ AATS5m} - 12,854 \text{ MATS8m} + 0,210 \text{ PNSA3} \\ + 5,452 \text{ IC5} - 18,136 \text{ AMID_N} - 20,435$$

$$\text{pMIC}_{\text{CA}} = -0,002 \text{ ATSC4Z} + 38,440 \text{ MATS4c} + 1,174 \text{ GATS8s} \\ - 4,089 \text{ MINssCH2} + 4,268 \text{ IC5} + 1,288 \text{ Mor23p} - 16,690$$

The QSAR equation for modeling the antimicrobial activity of imidazolium gemini surfactant against *E. coli* and *C. albicans* is:

$$\text{pMIC}_{\text{EC}} = 0,022 \text{ ATSC4Z} - 0,082 \text{ ATSC4i} + 4,526 \text{ IC5} + 3,942 \text{ Mor13m} \\ + 6,168 \text{ Mor15v} - 3,168 \text{ Mor24se} - 20,291$$

$$\text{pMIC}_{\text{CA}} = -2,768 \text{ AATS8s} - 1,133 \text{ MATS8i} + 3,132 \text{ IC4} \\ + 2,024 \text{ Mor11p} - 6,994$$

New compound designs of quaternary ammonium gemini surfactant and imidazolium gemini surfactant have been made and antimicrobial activity is predicted against *E. coli* and *C. albicans*. The best designed cationic gemini surfactant as an antibacterial against *E. coli* is the compounds GQAS-19 and GIS-32 with pMIC antibacterial activity of 7.425 and 8.982, and as an antifungal against *C. albicans* is GQAS-22 and GIS-35 with a pMIC antifungal activity value of 11,482 and 8,002. Interaction studies using molecular docking showed that the proposed compounds GQAS-19, GQAS-22, GIS-32 and GIS-35 had lower antimicrobial activity compared to the co-crystalline ligands.

Keywords: antimicrobial activity, molecular docking, QSAR, cationic gemini surfactant, quaternary ammonium gemini surfactant, imidazolium gemini surfactant