

**SINTESIS DAN KAJIAN KOMPUTASI PENAMBATAN MOLEKUL
GRAFENA OKSIDA TERMODIFIKASI ZnO/EUGENOL
SEBAGAI AGEN ANTIBAKTERI**

KARISMA TRIATMAJA

22/500444/PPA/06351

INTISARI

Sintesis grafena oksida (GO) yang dikompositkan dengan ZnO/eugenol sebagai agen antibakteri dengan kajian penambatan molekul telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah memodifikasi material GO dengan ZnO/eugenol untuk meningkatkan aktivitas antibakteri dan menganalisis interaksinya secara komputasi. Penelitian dimulai dengan sintesis material GO menggunakan metode Hummer termodifikasi, dilanjutkan sintesis ZnO/eugenol dengan metode mekanokimia, dan sintesis komposit GO/ZnO/eugenol dengan metode sonokimia. Material hasil sintesis dikarakterisasi menggunakan XRD, FTIR, UV-Vis, SEM, dan TEM, kemudian diuji aktivitas antibakteri terhadap *E. coli* melalui metode zona hambat dan *Minimum Inhibitory Concentration* (MIC). Studi penambatan molekul dilakukan untuk mengkaji interaksi komposit dengan membran protein dan DNA girase B pada bakteri.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa komposit GO/ZnO/eugenol berhasil disintesis melalui modifikasi GO dengan ZnO/eugenol dengan metode sonokimia. Material komposit ini menunjukkan aktivitas antibakteri yang potensial untuk menghambat pertumbuhan bakteri *E. coli*. Aktivitas antibakteri komposit GO/ZnO/eugenol ditunjukkan dengan zona hambat berdiameter 11,5 mm dan uji MIC menunjukkan bahwa komposit GO/ZnO/eugenol dengan suspensi bahan 25 mg/mL dapat mencegah pertumbuhan koloni bakteri. Studi penambatan molekul menunjukkan bahwa komposit GO/ZnO/eugenol cenderung menghambat replikasi DNA melalui interaksi hidrogen dengan sisi aktif DNA gyrase bakteri *E. coli*.

Kata kunci: antibakteri, DNA girase B, *E. coli*, GO/ZnO/eugenol, penambatan molekul

SYNTHESIS AND COMPUTATIONAL STUDY OF MOLECULAR DOCKING OF GRAPHENE OXIDE MODIFIED WITH ZnO/EUGENOL AS ANTIBACTERIAL AGENT

KARISMA TRIATMAJA

22/500444/PPA/06351

ABSTRACT

Synthesis of graphene oxide (GO) composited with ZnO/eugenol as an antibacterial agent with molecular docking study has been conducted. The aim of this study were to modify GO material with ZnO/eugenol to improve antibacterial activity and analyze the interaction computationally. The research was started with the synthesis of GO material using the modified Hummer method followed by the synthesis of ZnO/eugenol using the mechanochemical method, and the synthesis of GO/ZnO/eugenol composite using the sonochemical method. The synthesized materials were characterized using XRD, FTIR, UV-Vis, SEM, TEM, and then tested for *E. coli* antibacterial activity through the inhibition zone and Minimum Inhibitory Concentration (MIC) methods. Molecular docking studies were conducted to recognize the interaction of the composite with membrane proteins and DNA gyrase B in bacteria.

Results showed that GO/ZnO/eugenol composite was successfully synthesized by modifying GO with ZnO/eugenol using the sonochemical method. This composite material shows potential antibacterial activity to inhibit the growth of *E. coli* bacteria. The antibacterial activity of the GO/ZnO/eugenol composite was shown by an inhibition zone of 11.5 mm in diameter and the MIC test indicated that the GO/ZnO/eugenol composite with 25 mg/mL material suspension completely prevented the growth of bacterial colonies. Molecular docking studies revealed that the GO/ZnO/eugenol composite tends to inhibit DNA replication through hydrogen interaction with the active site of *E. coli* bacterial DNA gyrase B.

Keywords: antibacterial, DNA gyrase B, *E. coli*, GO/ZnO/eugenol, molecular docking