

# STUDI FITOKIMIA DAN EVALUASI POTENSI ANTIBAKTERI EKSTRAK DAUN DAN BATANG *Selaginella ornata* (Hook & Grev.) Spring DARI TAMAN NASIONAL GUNUNG MERBABU

Aulia Rossa Nurrahmah

21/481126/BI/10838

Dosen Pembimbing: Dr. Tri Rini Nuringtyas, S.Si., M.Sc.

## INTISARI

*Selaginella ornata* merupakan tumbuhan yang banyak ditemukan pada berbagai ketinggian di kawasan Taman Nasional Gunung Merbabu. Tumbuhan ini mengandung berbagai senyawa fitokimia yang dipengaruhi oleh kondisi lingkungan yang berpotensi sebagai antibakteri. Penelitian mengenai profil senyawa fitokimia *S. ornata* di kawasan TNGM serta aktivitas antibakterinya belum pernah dilakukan. Oleh karena itu, penelitian dilakukan untuk mengidentifikasi kandungan senyawa fitokimia ekstrak daun dan batang *S. ornata* di TNGM serta menganalisis aktivitas antibakterinya terhadap *S. aureus* dan *E. coli* secara *in silico* dan *in vitro*. Penelitian dilakukan melalui ekstraksi daun dan batang *S. ornata* dengan metode maserasi, analisis profil metabolit dengan LC-HRMS, uji antibakteri secara *in vitro* menggunakan metode difusi cakram Kirby-Bauer terhadap *S. aureus* dan *E. coli*, serta uji *in silico* menggunakan *molecular docking* terhadap protein target FtsZ. Analisis farmakokinetik ligan dilakukan dengan prediksi *Lipinski's Rule of Five* dan *ADMET*. Hasil LC-HRMS menunjukkan bahwa 68% dari 25 senyawa tertinggi merupakan senyawa yang sama pada ekstrak daun dan batang, termasuk golongan asam amino, asam lemak, flavonoid, alkaloid, dan poliketida. Uji *in silico* mengungkapkan bahwa beberapa senyawa, seperti Communesin H, Ginkgetin, dan Bilobetin, memiliki potensi afinitas ikatan yang baik terhadap protein target. Analisis farmakokinetik ligan menunjukkan bahwa senyawa tersebut memenuhi sebagian besar kriteria *Lipinski's Rule of Five* dan memiliki profil *ADMET* yang mendukung. Namun, uji *in vitro* menunjukkan bahwa ekstrak daun dan batang tidak memiliki aktivitas antibakteri yang signifikan terhadap *S. aureus* maupun *E. coli*.

KATA KUNCI: *ADMET*, antibakteri, LC-HRMS, *molecular docking*, *Selaginella ornata*

# PHYTOCHEMICAL STUDY AND EVALUATION OF THE ANTIBACTERIAL POTENTIAL OF LEAF AND STEM EXTRACTS OF *Selaginella ornata* (Hook & Grev.) Spring FROM MOUNT MERBABU NATIONAL PARK

Aulia Rossa Nurrahmah

21/481126/BI/10838

Supervisor: Dr. Tri Rini Nuringtyas, S.Si., M.sc.

## ABSTRACT

*Selaginella ornata* is a plant commonly found at various altitudes in the Mount Merbabu National Park. This plant contains various phytochemical compounds influenced by environmental conditions, which have potential antibacterial properties. Research on the phytochemical profile of *S. ornata* in the Mount Merbabu National Park and its antibacterial activity has not been conducted before. Therefore, this study aimed to identify the phytochemical compounds in the leaf and stem extracts of *S. ornata* from Mount Merbabu National Park and analyze their antibacterial activity against *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* using both in silico and in vitro methods. Extraction of leaves and stems was performed using the maceration method, followed by metabolite profiling with LC-HRMS, in vitro antibacterial testing using the Kirby-Bauer disk diffusion method against *S. aureus* and *E. coli*, and in silico testing via molecular docking targeting the FtsZ protein. Pharmacokinetic analysis of ligands was conducted using Lipinski's Rule of Five and ADMET predictions. LC-HRMS results showed that 68% of the top 25 compounds were common to both leaf and stem extracts, including amino acids, fatty acids, flavonoids, alkaloids, and polyketides. In silico tests revealed that several compounds, such as Communesin H, Ginkgetin, and Bilobetin, exhibited strong binding affinity to the target protein. Pharmacokinetic analysis indicated that these compounds met most of Lipinski's Rule of Five criteria and had favorable ADMET profiles. However, in vitro tests showed that neither leaf nor stem extracts exhibited significant antibacterial activity against *S. aureus* or *E. coli*.

**KEYWORDS:** ADMET, antibacterial, LC-HRMS, molecular docking, *Selaginella ornata*