

ABSTRAK

Tasrari Qolbi Nur Kholis. 24020222130043. **Bioprospeksi Senyawa Bioaktif *Anabaena* Sp. Dari Ekosistem Mangrove Mangkang Berbasis LC-HRMS Sebagai Kandidat Obat Neurodegeneratif Secara *In Silico*** (dibawah dibimbing oleh Siti Nur Jannah dan Hermin Pancasakti Kusumaningrum)

Penyakit neurodegeneratif seperti Alzheimer dan Parkinson merupakan gangguan progresif pada sistem saraf yang prevalensinya terus meningkat di seluruh dunia. Cyanobacteria, khususnya *Anabaena* sp., diketahui menghasilkan berbagai senyawa bioaktif dengan potensi neuroprotektif, seperti aktivitas antioksidan, antiinflamasi, dan penghambatan enzim yang terlibat dalam penyakit neurodegeneratif. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif *Anabaena* sp. Mangkang sebagai kandidat obat penyakit neurodegeneratif secara *in silico* melalui pendekatan QSAR dan *molecular docking* terhadap target AChE dan MAO-B. Penelitian diawali dengan isolasi dan identifikasi *Anabaena* sp. menggunakan analisis morfologi dan sekuensing gen 16S rRNA. Profil senyawa bioaktif diperoleh melalui analisis LC-HRMS. Data senyawa hasil LC-HRMS kemudian dianalisis menggunakan metode QSAR berbasis *machine learning* dengan algoritma Random Forest, Gradient Boosting, Extra Trees, dan XGBoost untuk memprediksi aktivitas inhibisi terhadap target AChE dan MAO-B. Model terbaik dipilih berdasarkan parameter validasi statistik seperti R^2 , Q^2 , dan RMSE. Senyawa dengan hasil prediksi terbaik selanjutnya dianalisis menggunakan *molecular docking* untuk mengevaluasi afinitas pengikatan dan interaksi molekuler terhadap protein target. Hasil penelitian menunjukkan bahwa model QSAR mampu berdampak terhadap aktivitas biologis senyawa bioaktif *Anabaena* sp. Beberapa senyawa hasil LC-HRMS diprediksi memiliki aktivitas inhibisi tinggi terhadap target AChE dan MAO-B dengan nilai IC_{50} . Hasil *molecular docking* menunjukkan senyawa tersebut memiliki afinitas pengikatan yang kuat terhadap protein target serta membentuk interaksi dengan residu aktif penting pada situs pengikatan.

Kata Kunci: *Anabaena* sp., QSAR, *molecular docking*, neurodegeneratif, AChE, MAO-B, *in silico*