

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mensintesis dan memodelkan aktivitas enzim menggunakan sistem logam transisi melalui rekayasa material molibdenum disulfida (MoS_2) sebagai tiruan fenoksazinon sintase dan sintesis senyawa kompleks Cu(II)-basa Schiff sebagai inhibitor enzim DNA gyrase. MoS_2 disintesis melalui rute hidrotermal dan dikarakterisasi untuk menguji performa fotokatalitik aerobik pada reaksi kopling oksidatif 2-aminofenol menjadi fenoksazinon di bawah penyinaran cahaya tampak. Kompleks Cu(II) dengan ligan turunan 4-aminoantipirin dan vanilin (Cu-OVAAP dan Cu-PVAAP) disintesis dan dievaluasi afinitas pengikatannya melalui docking molekuler pada reseptor DNA gyrase serta diuji aktivitas antibakterinya secara *in vitro* menggunakan metode difusi sumur agar. Hasil penelitian menunjukkan bahwa rekayasa cacat berupa kekosongan sulfur pada struktur hierarkis MoS_2 berhasil mempersempit celah pita energi menjadi 1,59 eV dan meningkatkan luas permukaan spesifik menjadi 18,998 m^2/g . Hal ini memungkinkannya bertindak sebagai enzim tiruan dengan rendemen fenoksazinon mencapai 80,75% dan stabilitas penggunaan ulang yang sangat baik. Pada pemodelan inhibisi enzim, senyawa kompleks Cu(II) dengan geometri persegi datar berhasil disintesis. Uji bioaktivitas dan docking molekuler mengungkap bahwa kompleks Cu-PVAAP memiliki afinitas pengikatan yang lebih kuat (-8,8 kkal/mol terhadap Gyrase B *E. coli*) dan aktivitas antibakteri dua kali lipat lebih besar terhadap *E. coli* dibandingkan Cu-OVAAP. Perbedaan performa ini divalidasi sebagai akibat dari ketersediaan gugus hidroksi bebas pada Cu-PVAAP yang tidak terkoordinasi pada pusat logam, yang memungkinkannya membentuk ikatan hidrogen dengan residu asam amino pada situs aktif enzim seluler bakteri.

Kata Kunci: Pemodelan enzim, MoS_2 , fotokatalis, fenoksazinon, basa Schiff, tembaga(II), inhibitor DNA gyrase.