

ABSTRAK

Nama : Sisi Yovita Sari
Program Studi : 21334765
Judul Skripsi : Penghambatan Enoyl-Acyl Carrier Protein Reductase (InhA) Terhadap *Mycobacterium Tuberculosis* Senyawa Pada Aktif Daun Miana Merah (*Coleus atropurpureus*. L.) Secara *In Silico*

Tuberkulosis merupakan penyakit infeksi paru menular yang disebabkan oleh bakteri *Mycobacterium tuberculosis*. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mendapatkan data senyawa aktif dalam daun miana merah (*Coleus atropurpureus*. L.) yang mempunyai aktivitas untuk menghambat Enoyl-acyl Carrier Protein Reductase (InhA) pada *Mycobacterium tuberculosis*. Penelitian ini menggunakan metode *in silico* dengan docking komputasional dan reseptor dari file Protein Data Bank 3FNH, dievaluasi dengan Lipinski Rule Of Five. Perangkat lunak yang digunakan YASARA, MarvinSketch, dan PLANTS yang digunakan untuk mengoptimasi ligan serta menambatkan molekul ligan dengan reseptor. Divisualisasikan dengan Discovery Studio 2021, dianalisis dengan prediksi ADMET dan diprediksi aktivitas biologis dengan PASS Online. Hasil docking menunjukkan yaitu dilihat dari skor *docking* phytosterol - 106,454 dan rosmarinic acid -100,65 merupakan dua senyawa aktif dari daun miana merah yang memiliki skor docking lebih tinggi diatas native ligan dan kontrol positif. Dapat disimpulkan bahwa kedua senyawa tersebut dapat dijadikan sebagai kandidat obat baru untuk menghambat protein Enoyl-acyl Carrier Protein Reductase (InhA) pada *Mycobacterium tuberculosis*.

Kata Kunci : *Mycobacterium tuberculosis*, Enoyl-acyl Carrier ProteinReductase(InhA), Daun Miana Merah, *In Silico*

ABSTRACT

Nama : Sisi Yovita Sari
Program Studi : 21334765
Judul Skripsi : Penghambatan Enoyl-Acyl Carrier Protein Reductase (InhA) Terhadap *Mycobacterium Tuberculosis* Senyawa Pada Aktif Daun Miana Merah (*Coleus atropurpureus*. L.) Secara *In Silico*

Tuberculosis is a contagious lung infection caused by the bacteria *Mycobacterium tuberculosis*. The aim of this research is to obtain data on active compounds in red miana leaves (*Coleus atropurpureus*. L.) which have activity to inhibit Enoyl-acyl Carrier Protein Reductase (InhA) in *Mycobacterium tuberculosis*. This research uses *in silico* methods with computational docking and receptors from the 3FNH Protein Data Bank file, evaluated with the Lipinski Rule Of Five. The software used YASARA, MarvinSketch, and PLANTS is used to optimize ligands and tether ligand molecules to receptors. Visualized with Discovery Studio 2021, analyzed with ADMET prediction and predicted biological activity with PASS Online. The docking results show that judging from the docking score, phytosterol - 106.454 and rosmarinic acid - 100.65 are two active compounds from red miana leaves which have a higher docking score above the native ligand and positive control. It can be concluded that these two compounds can be used as new drug candidates to inhibit the Enoyl-acyl Carrier Protein Reductase (InhA) protein in *Mycobacterium tuberculosis*.

Keywords : *Mycobacterium tuberculosis*, Enoyl-acyl Carrier Protein Reductase(InhA), Red Miana Leaves, *In Silico*