

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* POTENSI SENYAWA KATEKIN TEH HIJAU (*Camellia sinensis* L.) SEBAGAI ANTI BAKTERI TERHADAP *Mycobacterium tuberculosis* PADA INHA DAN KAT-G

Rizki Luthfiana, Sri Rahayu Dwi Purnaningtyas

TBC disebabkan oleh *Mycobacterium tuberculosis* menyebabkan kasus global, hampir setengah juta kasus memiliki bentuk resistensi multidrug (MDR) penyakit. Organisasi Kesehatan Dunia (WHO) berencana untuk menghilangkan TBC pada tahun 2030 di seluruh dunia. (Who.2021). Teh (*Camellia sinensis* L.) Ekstrak Teh Hijau (*Camellia sinensis* L.) mengandung katekin banyak digunakan dalam pengobatan tradisional karena aktivitas farmakologinya yang baik (Anand. Et.all.2017). Ekstrak katekin juga bersifat anti bakterisida terhadap *Mycobacterium tuberculosis* (Narayanan. et all.2017). *In silico* merupakan suatu istilah untuk percobaan atau uji yang dilakukan dengan melalui simulasi komputer. Metode *in silico* telah menjadi metode yang digunakan untuk mengawali penemuan senyawa obat baru dan untuk meningkatkan efisiensi dalam optimasi aktivitas senyawa induk (Hardjono, 2016). Hasil prediksi toksisitas menunjukkan bahwa EG dan EGC berada pada kelas VI, ECG dan EGCG berada pada kelas VI. Sedangkan Isoniazid sebagai senyawa pembanding berada pada kelas III. hasil docking molekuler antara reseptor 1ENY (inhA) dengan ligan EC, ECg, EGC, EGCG dan Isoniazid. Hasil *binding Affinity* terkecil adalah pada ECG yaitu -10,4 kkal/mol. Lebih kecil dibandingkan *binding affinity* senyawa Isoniazid yaitu -0,6 kkal/mol. hasil molecular docking antara 1SJ2 dari KatG dengan komponen katekin dan zat Isoniazid didapatkan *binding affinity* terkecil adalah pada EGCG yaitu -0,9 kkal/mol lebih kecil dibandingkan *binding affinity* zat pembanding Isoniazid yaitu -6,1 kkal/mol. prediksi bioaktivitas komponen katekin EC, ECG, EGC dan EGCG mempunyai potensi rendah sebagai Anti bakteri karena keempatnya memiliki nilai $P_a < 0,5$.

Kata kunci: *Mycobacterium tuberculosis*, Katekin, inhA, KatG

ABSTRACT

IN SILICO STUDY OF THE POTENTIAL OF GREEN TEA CATECHIN COMPOUNDS (*Camellia sinensis* L) AS ANTIBACTERIAL AGAINST *Mycobacterium tuberculosis* IN INHA AND KATG

Rizki Luthfiana, Sri Rahayu Dwi Purnaningtyas

TB is caused by *Mycobacterium tuberculosis* causing global cases, nearly half a million cases have the multidrug resistance (MDR) form of the disease. The World Health Organization (WHO) plans to eliminate TB by 2030 worldwide. (Who. 2021). Green Tea (*Camellia sinensis* L.) extract containing catechins is widely used in traditional medicine because of its good pharmacological activity (Anand. Et.all.2017). Catechin extract also has anti-bactericidal properties against *Mycobacterium tuberculosis* (Narayanan. et all. 2017). In silico is a term for experiments or tests carried out through computer simulation. The *insilico* method has become a method used to initiate the discovery of new drug compounds and to increase efficiency in optimizing the activity of parent compounds (Hardjono, 2016). The toxicity prediction results showed that EG and EGC were in class VI, ECG and EGCG were in class VI. Meanwhile, Isoniazid as a comparison compound is in class III. results of molecular docking between the 1ENY (inhA) receptor and the ligands EC, ECg, EGC, EGCG and Isoniazid. The smallest binding affinity result was on the ECG -10.4 kcal/mol. Smaller than the binding affinity of the compound Isoniazid -0.6 kkl/mol. The results of molecular docking between 1SJ2 from KatG with the catechin component and the substance Isoniazid showed that the smallest binding affinity was for EGCG -0.9kcal/mol, which is smaller than the binding affinity of the comparison substance. Isoniazid is -6.1 kcal/mol. The predicted bioactivity of the catechin components EC, ECG, EGC and EGCG have low potential as antibacterials because have Pa values <0.5.

Keywords: *Mycobacterium tuberculosis*, Katechin, inhA, KatG