

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA 14-DEOKSI-12- HIDROKSIANDROGRAFOLIDA DARI SAMBILOTO (*Andrographis paniculata*) SEBAGAI INHIBITOR POLIKETIDA SINTASE 13 (Pks13) *Mycobacterium tuberculosis* STRAIN H37Rv

Multi Drug Resistant Tuberculosis (MDR-TB) adalah tipe tuberkulosis yang sudah kebal terhadap antibiotik lini pertama, sehingga menjadi masalah untuk kesehatan secara global. Obat lini pertama memiliki sifat antibakteri dan terdapat dalam tumbuhan bergenus *Andrographis*. Sambiloto (*Andrographis paniculata*) adalah tanaman yang terbukti secara ilmiah mempunyai efek sebagai antibakteri. Tujuan penelitian ini ialah untuk mengetahui potensi dan interaksi senyawa 14-deoksi-12-hidroksiandrografolida dari sambiloto sebagai antibakteri penghambat poliketida sintase 13 (Pks13) menggunakan uji *molecular docking*. Metode yang digunakan berdasarkan *oriented docking* dengan kompleks protein ligan dibuat *semi fleksible docking* menggunakan *software* Autodock Vina. Hasil menunjukkan ligan sampel (14-deoksi-12-hidroksiandrografolida) berpotensi sebagai penghambat Pks13 dibuktikan dengan nilai *binding affinity* (ΔG) sebesar $-6,7$ kcal/mol, hasil ini diperkuat oleh (ΔG) dari ligan kontrol (2-(4-hydroxyphenyl)-~{n}-methyl-5-oxidanyl-4-(Piperidin-1-ylmethyl)-1-benzofuran-3-carboxamide) dan ligan pembanding (5-(Azetidin-1-ylmethyl)-6-hydroxy-2-(2-hydroxyphenyl)-4H-chromen-4-one) sebesar $-6,6$ kcal/mol. Ketiga ligan tersebut masing-masing memiliki ikatan hidrogen dan ikatan van der waals.

Kata-kata kunci: *docking*; inhibitor; poliketida sintase 13 (Pks13); sambiloto; tuberkulosis.