

ABSTRAK

FEBRIANTI ALPENIDA. 2026. **Analisis *In Silico* Senyawa Aktif Air Sadapan Batang Kapulaga Jawa (*Wurfbainia compacta* (Sol. ex Maton) Skornick. & A.D. Poulsen) sebagai Kandidat Antituberkulosis untuk Suplemen Bahan Ajar Biologi.** Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan. Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Tuberkulosis (TB) merupakan penyakit infeksi yang disebabkan oleh *Mycobacterium tuberculosis* dan masih menjadi masalah kesehatan dunia, terutama dengan meningkatnya kasus resistensi obat. Salah satu target penting dalam pengembangan obat antituberkulosis adalah enzim *enoyl-acyl carrier protein reductase* (InhA) yang berperan dalam proses biosintesis asam mikolat pada dinding sel *M. tuberculosis*. Air sadapan batang kapulaga Jawa (*Wurfbainia compacta*) diketahui mengandung berbagai senyawa aktif yang berpotensi memiliki aktivitas biologis. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi potensi senyawa aktif dari air sadapan batang kapulaga Jawa (*Wurfbainia compacta*) sebagai kandidat inhibitor enzim InhA secara *in silico*. Metode yang digunakan meliputi *molecular docking* untuk mengetahui afinitas pengikatan antara ligan uji dan reseptor InhA (PDB ID: 4TRN), serta analisis sifat fisikokimia berdasarkan *Lipinski's Rule of Five*, prediksi farmakokinetik (ADME), dan toksisitas secara *in silico*. Berdasarkan hasil analisis GC-MS, teridentifikasi 17 senyawa, kemudian dilakukan seleksi sehingga diperoleh 9 senyawa yang digunakan sebagai ligan uji dalam penelitian ini. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa seluruh senyawa uji mampu berinteraksi dengan enzim InhA dengan nilai *binding affinity* berkisar antara $-5,5$ hingga $-9,7$ kcal/mol. Senyawa Estra-1,3,5(10)-trien-17 β -ol menunjukkan nilai *binding affinity* paling rendah yaitu $-9,7$ kcal/mol, lebih baik dibandingkan ligan pembanding isoniazid ($-5,7$ kcal/mol). Selain itu, senyawa Estra-1,3,5(10)-trien-17 β -ol memenuhi parameter fisikokimia, memiliki profil farmakokinetik yang baik, serta menunjukkan nilai LD₅₀ sebesar 5000 mg/kg yang termasuk dalam kategori toksisitas rendah (kelas 6). Oleh karena itu, Estra-1,3,5(10)-trien-17 β -ol berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat inhibitor enzim InhA dalam pengembangan obat antituberkulosis secara *in silico*.

Kata kunci: *in silico*, *molecular docking*, tuberkulosis, *Wurfbainia compacta*

ABSTRACT

FEBRIANTI ALPENIDA. 2026. *In Silico Analysis of Active Compounds from the Stem Sap of Javanese Cardamom (Wurfbainia compacta (Sol. ex Maton) Skornick. & A.D. Poulsen) as Potential Antituberculosis Candidates for Biology Learning Supplementary Materials*. Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan. Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Tuberculosis (TB) is an infectious disease caused by Mycobacterium tuberculosis and remains a global health problem, particularly with the increasing incidence of drug resistance. One of the important targets in antituberculosis drug development is the enzyme enoyl-acyl carrier protein reductase (InhA), which plays a role in the biosynthesis of mycolic acid in the bacterial cell wall. The sap of Java cardamom (Wurfbainia compacta) stems is known to contain various bioactive compounds with potential biological activities. This study aimed to predict the potential of active compounds from the sap of Wurfbainia compacta stems as candidate inhibitors of the InhA enzyme through an in silico approach. The methods used included molecular docking to evaluate the binding affinity between test ligands and the InhA receptor (PDB ID: 4TRN), as well as physicochemical analysis based on Lipinski's Rule of Five, pharmacokinetic (ADME) prediction, and toxicity assessment. Based on GC-MS analysis, 17 compounds were identified, of which 9 compounds were selected and used as test ligands in this study. The molecular docking results showed that all tested compounds were able to interact with the InhA enzyme, with binding affinity values ranging from -5.5 to -9.7 kcal/mol. Estra-1,3,5(10)-trien-17 β -ol exhibited the lowest binding affinity value (-9.7 kcal/mol), which was better than the reference ligand isoniazid (-5.7 kcal/mol). Furthermore, this compound met the physicochemical parameters, demonstrated favorable pharmacokinetic properties, and showed an LD_{50} value of 5000 mg/kg, categorized as low toxicity (class 6). Therefore, Estra-1,3,5(10)-trien-17 β -ol has the potential to be further developed as a candidate inhibitor of the InhA enzyme in antituberculosis drug development through an in silico approach.

Keyword: *in silico, molecular docking, tuberculosis, Wurfbainia compacta*