

INTISARI

Asetoasetil-CoA reduktase (PhaB) merupakan enzim yang dapat mereduksi *acetoacetyl*-CoA menjadi 3-*hydroxybutyryl* CoA dalam jalur biosintesis polihidroksialkanoat (PHA). Enzim asetasetil-CoA reduktase (PhaB) (EC 1.1.1.36) termasuk dalam kategori kelompok *short-chain dehydrogenase* atau *reductase* (SDR). Pada penelitian sebelumnya, telah dilakukan ekspresi dan purifikasi protein PhaB rekombinan. Hasil dari penelitian sebelumnya, menunjukkan bahwa protein PhaB memiliki kelarutan 60.70%. Pada penelitian ini, dilakukan analisis secara *in silico* terhadap enzim asetasetil-CoA reduktase (PhaB) dari *Priestia megaterium* PSA14. Analisis dimulai dengan analisis filogenetik, penjajaran sekuen, analisis karakteristik fisikokimia, analisis struktur sekunder, dan struktur tersier. Hasil yang didapatkan menunjukkan bahwa PhaB *Priestia megaterium* PSA14 berkerabat dekat dengan PhaB dari kelompok mesofil lainnya. PhaB memiliki struktur sesuai dengan FabG dari *Staphylococcus aureus* dengan identitas sekuens sebesar 48.35%. Analisis fisikokimia menunjukkan bahwa PhaB *Priestia megaterium* PSA14 memiliki ukuran 247aa dan berat molekul 26,09 kDa. Struktur sekunder PhaB tersusun atas inti 7 β -sheet yang dikelilingi oleh 10 α -helix. Residu katalitik PhaB *Priestia megaterium* PSA14 terletak pada S143, Y156, dan K160. Struktur tersier PhaB memiliki nilai Ramachandran favoured 96.73%.

Kata kunci: Analisis *In silico*, karakterisasi protein, Asetoasetil-CoA reduktase, *Priestia megaterium* PSA14

ABSTRACT

Acetoacetyl-CoA reductase (PhaB) is an enzyme that can reduce acetoacetyl-CoA to 3-hydroxybutyryl CoA in the polyhydroxyalkanoate (PHA) biosynthesis pathway. The enzyme acetoacetyl-CoA reductase (PhaB) (EC 1.1.1.36) belongs to the short-chain dehydrogenase or reductase (SDR) group category. In the previous work, PhaB has been successfully expressed and purified. The results of previous research show that the PhaB protein has a solubility of 60.70%. In this study, *in silico* analysis was carried out on the enzyme acetoacetyl-CoA reductase (PhaB) from *Priestia megaterium* PSA14. The analysis begins with phylogenetic analysis, sequence alignment, physicochemical characteristic analysis, secondary structure analysis, and tertiary structure analysis. The results obtained indicate that PhaB of *Priestia megaterium* PSA14 is closely related to PhaB from other mesophyll groups. PhaB has a fitting structure to FabG from *Staphylococcus aureus* with a sequence identity of 48.35%. Physicochemical analysis shows that PhaB *Priestia megaterium* PSA14 has a size of 247aa and a molecular weight of 26.09 kDa. The secondary structure of PhaB is composed of 7 β -sheet core surrounded by 10 α -helix. PhaB catalytic residues of *Priestia megaterium* PSA14 are located at S143, Y156, and K160. The tertiary structure of PhaB has a Ramachandran favorable value of 96.73%.

Keyword: *In silico* analysis, Protein characterization, Acetoacetyl-CoA reductase *Priestia megaterium* PSA14