

**PENAMBATAN *EPIGALLOCATECHINE GALLATE* TERHADAP BEBERAPA
RESEPTOR HIV**

SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat guna menempuh ujian sarjana pada
Program Studi S1-Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada

**OSA LADIFA
31116181**



**STIKES BAKTI TUNAS HUSADA
PROGRAM STUDI S1 FARMASI
TASIKMALAYA
2020**

ABSTRACT

Human Immunodeficiency Virus (HIV) is a disease that attacks immune cells where the spread is very fast and can cause death. Until now there has not been found a drug that can cure HIV but the use of anti-retroviral (ARV) for life by patients. Epigallocatechin gallate is one of the chemicals that can be extracted from tea and developed with the in silico method for the treatment of HIV. The purpose of this study was to determine the value of binding affinity, interaction and conformation and the lowest energy of the ligand compound Epigallocatechin Gallate. Includes 5 active compounds contained in Epigallocatechin gallate by in silico. Research methods include ligand preparation, receptor preparation, docking method validation, ligand docking and receptor analysis, Lipinski's Rule of Five analysis, and ADME study. The results of this study the value of binding affinity on the 2 best compounds namely Epigallocatechin gallate and Epicatechin gallate have the smallest value of other compounds namely -6,73 and -6,73kcal / mol. However, the epigallocatechin gallate compound has a more stable binding affinity value with lamivudine as a comparison drug of -4,08kcal / mol but not with native saquinavir ligand of -10,83kcal / mol.

Keywords: *Human Immunodeficiency virus (HIV), Epigallocatechin gallate, in silico, docking.*

ABSTRAK

Human Immunodeficiency Virus (HIV) suatu penyakit yang menyerang sel-sel kekebalan tubuh dimana penyebarannya sangat cepat dan dapat menyebabkan kematian. Sampai saat ini belum ditemukan obat yang dapat menyembuhkan HIV melainkan penggunaan Anti Retroviral (ARV) seumur hidup oleh pasien Epigallocatechin gallate adalah salah satu bahan kimia yang bisa diekstraksi dari teh dan dikembangkan dengan metode in silico untuk pengobatan HIV. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui nilai binding affinity, interaksi serta konformasi dan energi terendah dari ligan senyawa Epigallocatechin Gallate. Meliputi 5 Senyawa aktif yang terkandung dalam Epigallocatechin gallate secara in silico. Metode penelitian yang dilakukan meliputi preparasi ligan, preparasi reseptor, validasi metode docking, docking ligan dan reseptor, analisis Lipinski's Rule of Five, dan studi ADME. Hasil dari penelitian ini nilai binding affinity pada 2 senyawa terbaik yaitu Epigallocatechin gallate dan Epicatechin gallate memiliki nilai paling kecil dari senyawa lain yaitu -6,73 dan -6,73kcal/mol. Namun, senyawa epigallocatechingallate memiliki nilai binding affinity lebih stabil dengan obat pembanding lamivudin yaitu -4,08kcal/mol tetapi tidak dengan native ligan saquinavir yaitu -10,83kcal/mol.

Kata kunci :*Human Immunodeficiency virus (HIV), Epigallocatechin gallate, in silico, docking*