

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN PEPAYA (*Carica papaya* L.) UNTUK
ANTI-HIV**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana farmasi



MIRNA ANTIKA

31119161

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2023**

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN PEPAYA (*Carica papaya L.*) UNTUK ANTI-HIV

Mirna Antika

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Human immunodeficiency Virus (HIV) merupakan virus yang menginfeksi sel darah putih penyebab turunnya kekebalan tubuh. *Acquired Immune Deficiency Syndrome (AIDS)* sekumpulan gejala yang timbul disebabkan turunnya kekebalan tubuh akibat infeksi HIV. Adanya terapi antiretrovirus yang tidak efektif dapat mengakibatkan munculnya resistensi terhadap virus. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui kestabilan dan afinitas ikatan interaksi *molecular* yang terjadi antara senyawa metabolit sekunder pada tanaman (*Carica papaya L.*). Metode pada penelitian yaitu virtual skrining dilakukan dengan melakukan docking dengan menggunakan program PLANTS, lalu dilakukan penambatan dinamika molekuler dengan menggunakan *AmberTools*. Hasil *molecular docking* dari 17 senyawa yang diujikan yang terkandung dalam tanaman pepaya (*Carica papaya L.*) terhadap reseptor target 2BE2 didapatkan 2 senyawa terbaik yang memiliki *binding affinity* yang paling baik diantara senyawa lainnya yaitu Catechin (-108,924) dan R-prunasin (-108,153). Kesimpulan pada penelitian ini menunjukkan bahwa obat perbandingan saquinavir lebih stabil dibandingkan senyawa Catechin dan R-prunasin terhadap reseptor 2BE2 Sehingga belum bisa ditujukan sebagai antivirus HIV.

Kata kunci: *Carica papaya L, Virus HIV, Molecular Docking.*

Abstract

Human immunodeficiency virus (HIV) is a virus that infects white blood cells that cause decreased immunity. *Acquired Immune Deficiency Syndrome (AIDS)* a set of symptoms that arise due to decreased immunity due to HIV infection. The presence of ineffective antiretroviral therapy can result in the emergence of resistance to the virus. The purpose of this study was to determine the stability and bond affinity of molecular interactions that occur between secondary metabolite compounds in plants (*Carica papaya L.*). The method in the study, namely virtual screening, was carried out by docking using the PLANTS program, then tethering molecular dynamics using *AmberTools*. The results of molecular docking of 17 tested compounds contained in papaya plants (*Carica papaya L.*) against the 2BE2 target receptor, 2 best compounds were obtained that had the best binding affinity among other compounds, namely catechins (-108.924) and R-prunasin (-108.153). The conclusion of this study shows that the comparison drug saquinavir is more stable than Catechin and R-prunasin compounds against 2BE2 receptors so that it cannot be intended as an HIV antiviral.

Keywords: *Carica papaya L, HIV virus, molecular docking*