

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG
TERKANDUNG DALAM BUAH PARE (*Momordica charantia* L)
SEBAGAI ANTI-HIV/AIDS**

SKRIPSI



RESI MUSTIKA

31119163

**PROGRAM STUDI SI FARMASI
FAKULAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
AGUSTUS 2023**

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM BUAH PARE (*Momordica charantia* L) SEBAGAI ANTI-HIV AIDS

Resi Mustika, Saeful Amin, Hendy Suhendy

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikamalaya

Abstrak

HIV (*Human Immunodeficiency Virus*) adalah virus dalam genus *Lentivirus* dari family *Retroviridae* yang menyerang system kekebalan tubuh. Buah pare yang sering digunakan sebagai lalapan ternyata mengandung khasiat lebih bagi kesehatan. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui aktivitas senyawa antivirus serta mengetahui senyawa metabolit sekunder manakah dari Buah Pare yang lebih baik dan stabil pada reseptor anti HIV/AIDS secara *in silico*. Metode yang digunakan ialah studi komputasi dengan *molecular Docking*, Uji *pkCSM*, uji *drug-likeness* dan simulasi *molecular dynamics*. Hasil studi komputasi *molecular Docking* dari 40 senyawa Buah Pare didapatkan tiga senyawa terbaik yaitu *Cis-9-hexadecenal*, *Stigmasterol* dan *Momordol* yang memiliki *Binding affinity* yang terendah diantara senyawa lainnya. Pengujian *pkCSM* dari ketiga senyawa memiliki hasil yang baik tidak toksik. Hasil uji *drug – likeness* menunjukkan bahwa senyawa *Momordol* yang memenuhi syarat dari kriteria parameter uji tersebut. Hasil *molecular dynamics* dari semua senyawa selama 10ns menunjukkan nilai RMSD dan RMSF yang kurang stabil.

Kata kunci : Buah Pare, HIV/AIDS, *In Silico*.

Abstract

HIV (*Human Immunodeficiency Virus*) is a virus in the *Lentivirus* genus of the *Retroviridae* family that attacks the immune system. Pare fruit which is often used as fresh vegetables turns out to contain more health benefits. The purpose of this study was to determine the activity of antiviral compounds and to find out which secondary metabolite compounds from Bitter Gourd are better and more stable at anti-HIV/AIDS receptors *in silico*. The method used is a computational study with *molecular docking*, *pkCSM* test, *drug-likeness* test and *molecular dynamics* simulation. The results of a computational *molecular docking* study of 40 bitter melon compounds showed that the three best compounds were *Cis-9-hexadecenal*, *Stigmasterol* and *Momordol* which had the lowest binding affinity among other compounds. The *pkCSM* test of the three compounds had good nontoxic results. The results of the *drug-likeness* test showed that the *Momordol* compound met the requirements of the test parameter criteria. *Molecular dynamics* results of all compounds for 10ns showed less stable RMSD and RMSF values.

Keywords: *Momordica charantia* L, HIV/AIDS, *In Silico*