

**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF DAUN KELOR
(*Moringa oleifera*. L) TERHADAP ENZIM
ASETILKOLINESTERASE PADA ALZHEIMER**

SKRIPSI



NIDA KHAIRUNNISA

10016122248

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
AGUSTUS 2026**

**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF DAUN KELOR
(*Moringa oleifera*. L) TERHADAP ENZIM
ASETILKOLINESTERASE PADA ALZHEIMER**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat memperoleh Gelar Sarjana Farmasi



NIDA KHAIRUNNISA

10016122248

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
AGUSTUS 2026**

ABSTRAK

Studi In Silico Senyawa Aktif Daun Kelor (*Moringa oleifera* L.) Terhadap Enzim Asetilkolinesterase Pada Alzheimer

Nida Khairunnisa

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Daun kelor (*Moringa oleifera* L.) mengandung senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai inhibitor asetilkolinesterase (AChE) untuk terapi Alzheimer. Penelitian ini menganalisis 34 senyawa aktif melalui molecular docking pada reseptor 4EY7, 6O4W, dan 7E3H, analisis Lipinski, prediksi ADMET, serta molecular dynamics selama 100 ns. Pterygospermin menunjukkan afinitas paling konsisten, yaitu -11,13, -11,06, dan -11,10 kkal/mol, lebih rendah dibandingkan rivastigmin. Berdasarkan RMSD, Pterygospermin memiliki kestabilan terbaik pada 4EY7 dan 7E3H, sedangkan Hirsutrin pada 6O4W. Analisis RMSF dan protein–ligand contacts menunjukkan interaksi relatif stabil. Pterygospermin berpotensi sebagai kandidat inhibitor AChE berbasis bahan alam, namun memerlukan validasi lebih lanjut secara *in vitro* dan *in vivo*.

Kata kunci: Alzheimer, asetilkolinesterase, *in silico*, *Moringa oleifera*, Pterygospermin.

Abstract

Moringa (Moringa oleifera L.) leaves contain bioactive compounds with potential as acetylcholinesterase (AChE) inhibitors for Alzheimer's therapy. This study analyzed 34 active compounds through molecular docking against receptors 4EY7, 6O4W, and 7E3H, Lipinski analysis, ADMET prediction, and 100 ns molecular dynamics simulations. Pterygospermin showed the most consistent binding affinities of -11.13, -11.06, and -11.10 kcal/mol, lower than rivastigmine. Based on RMSD, Pterygospermin exhibited the best stability with 4EY7 and 7E3H, while Hirsutrin was most stable with 6O4W. RMSF and protein-ligand contact analyses indicated relatively stable interactions. Pterygospermin shows promise as a natural AChE inhibitor candidate, although further in vitro and in vivo validation is required.

Keywords: Alzheimer, acetylcholinesterase, *in silico*, *Moringa oleifera*, Pterygospermin.