

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF TANAMAN TEH HIJAU
(*Camellia sinensis*) TERHADAP ENZIM
ASETIKOLINESTERASE (AChE) SEBAGAI TERAPI
ALZHEIMER**

SKRIPSI



SINTA DEWI MARYAM

10016122236

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

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF TANAMAN TEH HIJAU
(*Camellia sinensis*) TERHADAP ENZIM
ASETIKOLINESTERASE (AChE) SEBAGAI TERAPI
ALZHEIMER**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat memperoleh gelar Sarjana Farmasi



SINTA DEWI MARYAM

10016122236

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

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa Aktif Tanaman Teh Hijau (*Camellia sinensis*) Terhadap Enzim Asetilkolinesterase (AChE) Sebagai Terapi Alzheimer

Sinta Dewi Maryam

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Pendahuluan: Penyakit Alzheimer merupakan gangguan neurodegeneratif yang berkaitan dengan disfungsi sistem kolinergik dan penurunan kadar asetilkolin akibat aktivitas enzim asetilkolinesterase (AChE). Teh hijau (*Camellia sinensis*) mengandung berbagai senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai kandidat inhibitor AChE. **Tujuan:** Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi 30 senyawa aktif teh hijau sebagai kandidat inhibitor AChE menggunakan pendekatan *in silico*. **Metode:** Penelitian komputasi dilakukan dengan metode *molecular docking* menggunakan PyRx pada tiga reseptor AChE (4EY7, 6O4W, dan 7E3H), *molecular dynamics* menggunakan perangkat lunak Desmond selama 100 ns, analisis *Drug Scan* berdasarkan *Lipinski's Rule of Five*, serta prediksi farmakokinetik (ADMET) melalui situs web pkCSM. **Hasil:** Hasil *molecular docking* menunjukkan EGCG sebagai senyawa terbaik pada reseptor 4EY7 (-9,88 kkal/mol) dan 7E3H (-10,32 kkal/mol), ECG terbaik pada reseptor 6O4W (-10,11 kkal/mol), dan Theaflavin menunjukkan afinitas yang baik pada 7E3H (-10,16 kkal/mol), dengan nilai afinitas lebih rendah dibandingkan rivastigmin (-8,16 hingga -8,48 kkal/mol). Simulasi *molecular dynamics* 100 ns menunjukkan kompleks EGCG-6O4W paling stabil dengan RMSD 1,669 Å dan RMSF 0,835 Å. Prediksi ADMET menunjukkan seluruh senyawa memiliki profil toksisitas yang baik dengan uji AMES negatif dan tidak terprediksi hepatotoksik, meskipun memiliki keterbatasan pada absorpsi oral dan penetrasi sawar darah otak. **Kesimpulan:** Hal ini mengindikasikan bahwa senyawa-senyawa tersebut memiliki potensi sebagai kandidat inhibitor AChE berbasis bahan alam untuk terapi penyakit Alzheimer, namun memerlukan validasi eksperimental lebih lanjut melalui uji *in vitro* dan *in vivo*.

Kata kunci: *Camellia sinensis*, Alzheimer, asetilkolinesterase, *molecular docking*, *molecular dynamics*.

Abstract

Introduction: Alzheimer's disease is a neurodegenerative disorder associated with cholinergic system dysfunction and decreased acetylcholine levels due to acetylcholinesterase (AChE) activity. Green tea (*Camellia sinensis*) contains various bioactive compounds that have potential as AChE inhibitors. **Objective:** This study aims to evaluate the potential of 30 active compounds of green tea as AChE inhibitor candidates using an *in silico* approach. **Methods:** Computational research was conducted using molecular docking with PyRx on three AChE receptors (4EY7, 6O4W, and 7E3H), molecular dynamics with Desmond software for 100 ns, Drug Scan analysis based on Lipinski's Rule of Five, and pharmacokinetic (ADMET) prediction through the pkCSM website. **Results:** Molecular docking results showed EGCG as the best compound on 4EY7 (-9.88 kcal/mol) and 7E3H (-10.32 kcal/mol), ECG as the best on 6O4W (-10.11 kcal/mol), and Theaflavin also showed good affinity on 7E3H (-10.16 kcal/mol), with affinity values lower than rivastigmine (-8.16 to -8.48 kcal/mol). Molecular dynamics simulation for 100 ns showed the EGCG-6O4W complex was the most stable with RMSD of 1.669 Å and RMSF of 0.835 Å. ADMET prediction showed all compounds had good toxicity profiles with negative AMES test and no hepatotoxicity prediction, although they had limitations in oral absorption and blood-brain barrier penetration. **Conclusion:** This indicates that these compounds have potential as natural-based AChE inhibitor candidates for Alzheimer's disease therapy, but further experimental validation through *in vitro* and *in vivo* studies is needed.

Keywords : *Camellia sinensis*, Alzheimer, acetylcholinesterase, molecular dynamics. molecular dynamics.