

ABSTRAK

Nama : Tri Maratuzzakiyah
Program Studi : Farmasi
Judul : Studi In Silico Senyawa Aktif Tanaman Sambiloto
(*Andrographis paniculata* Nees.) Terhadap Reseptor
Protease HIV-1

Human Immunodeficiency Virus (HIV) merupakan virus yang menyerang sistem kekebalan tubuh, dan pada akhirnya dapat menyebabkan *Acquired Immune Deficiency Syndrome* (AIDS). Sambiloto (*Andrographis paniculata* Nees.) merupakan salah satu jenis tanaman herba yang termasuk dalam Famili Acanthaceae dan banyak digunakan oleh masyarakat sebagai obat salah satunya adalah sebagai anti-HIV. Tujuan penelitian ini untuk menentukan kandidat senyawa aktif dari tanaman sambiloto yang mampu menghambat kerja enzim protease HIV-1 dengan metode insilico. Data senyawa kimia sambiloto diperoleh dari situs *pubchem* dan struktur reseptor Protease HIV-1 didapat dari Bank Data Protein dengan kode PDB 1D4H. Perangkat lunak yang digunakan yaitu YASARA, *MarvinSketch*, dan PLANTS. Divisualisasi menggunakan *Discovery Stucio Visualizer* dan dilakukan prediksi ADMET. Hasil *molecular docking* menunjukkan bisandrographolide dan phytol memiliki potensi sebagai obat anti HIV dengan skor *docking* -98,238 dan -88,522 dibandingkan dengan amprenavir sebagai ligan pembanding dengan skor *docking* -101,217. Hasil visualisasi protein-ligan menunjukkan senyawa bisandrographolide memiliki interaksi kestabilan yang baik. Hasil uji Prediksi ADMET menggunakan program *pkCSM online tool* menunjukkan bahwa senyawa bisandrographolide mempunyai sifat farmakokinetik yang baik, dan menimbulkan toksisitas yang relatif rendah.

Kata kunci : Sambiloto, *Molecular Docking*, Protease HIV-1

ABSTRACT

Name : Tri Maratuzzakiyah
Major : Pharmacy
Title : In silico Study of Active Compounds of Sambiloto Plant (*Andrographis paniculata* Nees.) Against HIV-1 Protease Receptors

Human Immunodeficiency Virus (HIV) is a virus that attacks the immune system, and at the end can eventually cause *Acquired Immune Deficiency Syndrome* (AIDS). Sambiloto (*Andrographis paniculata* Nees.) is a type of herbaceous plant that belongs to the Acanthaceae famili and is widely used by the public as medicine, one of which is anti-HIV. The purpose of this study was to determine candidate active compounds from sambiloto plant that able to inhibit the work of HIV-1 protease enzyme using the Insilico method. The data of chemical compound of sambiloto was obtained from *pubchem site* and the structure of HIV-1 protease receptor got from Protein Data Bank with the code PDB 1D4H. The software used are YASARA, *MarvinSketch*, and PLANTS. Visualized using *Dizcovery Studio Visualizer* and the ADMET prediction were made. The result of *molecular docking* showed that bisandrographolide and phytol have potential as anti-HIV drugs with *docking* score -98.238 and -88.552 that compared with amprenavir as a comparison ligand with *docking* score -101.217. The result of protein-ligand visualization showed that bisandrographolide compound had good stability interactions. The result of the ADMET prediction test using *pkCSM online tool* program show that bisandrographolide has good pharmacokinetic propertise, and causes a low relativity toxinity.

Keywords :

Sambiloto, *Molecular Docking*, Protease HIV-1