





**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF TANAMAN  
SAMBILOTO (*Andrographis paniculata* Ness.) TERHADAP  
RESEPTOR PROTEASE HIV-1**

**NAMA : TRI MARATUZZAKIYAH**

**NIM : 17330079**

**PROGRAM STUDI FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
INSTITUT SAINS DAN TEKNOLOGI NASIONAL  
JAKARTA**

**2022**



**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF TANAMAN  
SAMBILOTO (*Andrographis paniculata* Ness.) TERHADAP  
RESEPTOR PROTEASE HIV-1**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu untuk memperoleh gelar  
Sarjana Farmasi**

**NAMA : TRI MARATUZZAKIYAH  
NIM : 17330079**

**PROGRAM STUDI FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
INSTITUT SAINS DAN TEKNOLOGI NASIONAL  
JAKARTA**

**2022**

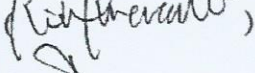


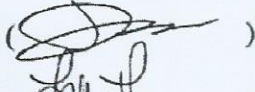
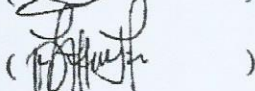


## HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :  
Nama : Tri Maratuzzakiyah  
NPM : 17330079  
Program Studi : Farmasi  
Judul Skripsi : Studi In Silico Senyawa Aktif Tanaman Sambiloto  
(*Andrographis paniculata* Nees.) Terhadap Reseptor  
Protease HIV-1

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional.

## DEWAN PENGUJI

Pembimbing I : Rosario Trijuliamos Manalu, SP., M.Si. (  )  
Pembimbing II : Dr.apt Tiah Rachmatiah, M.Si. (  )  
Penguji 1 : Prof, Dr. apt. Teti Indrawati, M.S. (  )  
Penguji 2 : Desy Muliana Wenas, S.Si., M.Si. (  )  
Penguji 3 : Fathin Hamida, S.Si., M.Si. (  )

Ditetapkan di : Jakarta

Tanggal : September 2022

## KATA PENGANTAR

Puji syukur saya panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa, karna atas berkat dan rahmat-Nya, sehingga saya dapat menyelesaikan penyusunan skripsi yang berjudul **“Studi In Silico Senyawa Aktif Tanaman Sambiloto (*Andrographis paniculata* Nees.) Terhadap Reseptor Protease HIV-1”** dengan baik dan lancar. Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Farmasi pada Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional.

Dalam penyusunan skripsi ini, saya banyak mendapatkan bimbingan, saran, masukan dan bantuan dari berbagai pihak. Untuk itu dalam kesempatan ini saya ingin ucapan terima kasih disampaikan kepada bapak Rosario Trijuliamos Manalu, SP., M.Si. dan ibu Dr. apt.Tiah Rachmatiah, M.Si. selaku dosen pembimbing atas arahan dan masukannya untuk skripsi ini. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada :

1. Dekan Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional Jakarta  
Ibu Dr. apt. Refdanita, M.Si.
2. Kepala Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional Ibu apt. Yayah Djuhariah, M.Si.
3. Sekretaris Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional Bapak Saiful Bahri, S.Si., M.Si.
4. Dosen Penasihat Akademik Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional Ibu Ika Maruya, M.Si.
5. Seluruh Dosen dan Staf Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Institut Sains dan Teknologi Nasional.
6. Kedua orang tua saya Bapak Sukardi dan Ibu Siti Hapsah, kakakku Yesi Sukowati dan Cekly Putri Astuti yang telah memberikan doa serta dukungan selama ini sehingga dapat menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
7. Semua pihak yang telah membantu yang tidak dapat saya sebutkan satu persatu.

Semoga Allah SWT melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya kepada kita semua. Saya mengharapkan kritik dan saran yang bersifat membangun demi perbaikan skripsi ini. Semoga skripsi ini dapat diterima dan bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan khususnya di bidang Farmasi.

Jakarta, Januari 2022



## 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 Studio 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 ProteaseReceptors

*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