

PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL DALAM SENYAWA PARE (*Momordica charantia* L.) TERHADAP RESEPTOR PfA-M1

ZULFAN RODIA AKBAR

201FF03189

Program Studi Sarjana Farmasi, Fakultas Farmasi
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Malaria di Indonesia pada tahun 2023 secara fluktuatif tertinggi yaitu sebesar 3,1 juta, meningkat sekitar 56% dari tahun sebelumnya. Hal ini dikarenakan Indonesia merupakan daerah tropis dan memiliki daerah endemis malaria yang menjadi masalah serius. Penelitian terhadap antimalaria pada pare (*Momordica charantia* L.) ini masih jarang sekali dilakukan. Salah satu penelitian dilakukan uji aktivitas antiplasmodium pada bagian daun dengan cara mengekstrak daun pare menggunakan etanol 70%. Tujuan dilakukannya penelitian ini yaitu untuk mengetahui senyawa yang bertanggung jawab sebagai antiplasmodium. Komputasi (*In Silico*) menjadi metode yang digunakan untuk mengetahui interaksi senyawa pare terhadap reseptor *Plasmodium falciparum* M1 alanyl aminopeptidase (PfA-M1). Tahapan yang dilakukan yaitu persiapan protein target, persiapan protein ligan, optimasi geometri, validasi metode docking, docking senyawa uji, simulasi dinamika molekul. Dari 158 senyawa, diperoleh senyawa ke 129, 152 dan 153 yang memiliki potensi sebagai antimalaria. Ketiga senyawa tersebut memiliki aktivitas antimalaria.

KATA KUNCI : Malaria, Penambatan molekul, Artemisinin, Pare, Dinamika molekul

**MOLECULAR DOCKING AND SIMULATION OF MOLECULAR DYNAMICS IN
PARE (*Momordica charantia* L.) SOLUTIONS AS ANTIMALARIA AGAINST PfA-M1
RESPECTORS**

ZULFAN RODIA AKBAR

201FF03189

Bachelor of Pharmacy Study Program, Faculty of Pharmacy

Bhakti Kencana University

ABSTRACT

*Malaria in Indonesia in 2023 will fluctuate the highest, namely 3.1 million, an increase of around 56% from the previous year. This is because Indonesia is a tropical region and has malaria endemic areas which are a serious problem. Research on antimalarials on bitter melon (*Momordica carantia* L.) is still rarely carried out. One study carried out antiplasmodium activity tests on leaves by extracting bitter melon leaves using 70% ethanol. The aim of this research is to determine the compound responsible for antiplasmodium. Computation (In Silico) is the method used to determine the interaction of bitter melon compounds with the Plasmodium falciparum M1 alanyl aminopeptidase (PfA-M1) receptor. The stages carried out are target protein preparation, ligand protein preparation, geometry optimization, docking method validation, test compound docking, molecular dynamics simulation. Of the 158 compounds, compounds 129, 152 and 153 were obtained which have potential as antimalarials. These three compounds have antimalarial activity.*

KEY WORDS: *Malaria, Docking Molecular, Artemisinin, Bitter melon, Molecular dynamics.*