

**POTENSI KUERSETIN DAN MIRISETIN SEBAGAI  
KANDIDAT IMUNOMODULATOR DALAM MENGHAMBAT  
*SARS-CoV-2: STUDI IN SILICO***

**SKRIPSI**

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

**MEITA DEA RISTIANI**

**31117124**



**PROGRAM STUDI S1-FARMASI  
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA**

**2021**

**POTENSI KUERSETIN DAN MIRISETIN SEBAGAI  
KANDIDAT IMUNOMODULATOR DALAM MENGHAMBAT  
*SARS-CoV-2*: STUDI *IN SILICO***

**SKRIPSI**

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

**MEITA DEA RISTIANI**

**31117124**

**PROGRAM STUDI S1-FARMASI  
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA**

**2021**

## ABSTRAK

### Potensi Mirisetin dan Kuersetin sebagai kandidat imunomodulator dalam menghambat SARS-CoV-2 secara *In Silico*

Meita Dea Ristiani

Program Studi S-1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

#### Abstrak

Pencarian pengobatan preventif patogen virus SARS-CoV-2 merupakan kebutuhan penting saat ini. Meskipun sudah ditemukannya vaksin darurat tetapi hal ini belum cukup untuk melakukan pencegahan secara signifikan. Maka tujuan penelitian ini melakukan identifikasi senyawa flavonoid yaitu kuersetin dan mirisetin diduga memiliki aktivitas sebagai imunomodulator dalam menghambat virus SARS-CoV-2 menggunakan studi *in silico*. Sampel senyawa struktur 3D dari PubChem dengan struktur 3D protein *Fab-Antibody* di *docking* menggunakan *AutodockTools* dan *SwissDock* kemudian divalidasi dengan melakukan *Molecular Dynamic*. Hasil akhir konformasi kemudian divisualisasi menggunakan *Biovia Discovery studio*, dianalisis efektivitas program *docking*, farmakokinetik, toksisitas dan program *dynamic* dengan plot *Ramachandran*. Dari hasil *docking* menggunakan *swissdock* diketahui senyawa kuersetin memiliki aktivitas yang baik dengan reseptor 7KZA dengan nilai  $\Delta G$  -8.22 dan hasil *docking* dengan *AutodockTools* yaitu reseptor 7JMO dengan  $\Delta G$  sebesar -7.66. dilanjutkan *Molecular Dynamic* berinteraksi dengan baik pada reseptor 7KZA dengan *disallowed religion* sebesar 0,94% dan *favoured region* sebesar 87,264%. Sedangkan pada hasil *docking* senyawa mirisetin dengan *AutodockTools* maupun *SwissDock* memiliki kesamaan interaksi baik dengan protein 7B30 dengan masing – masing nilai  $\Delta G$  sebesar -7.55 dan -8.39, dan divalidasi dengan hasil *Molecular Dynamic* memiliki ikatan yang stabil pada reseptor 7B30 juga dengan *disallowed religion* sebesar 4,5% dan *most favoured region* sebesar 84,456%. Senyawa uji kuersetin dan mirisetin berpotensi memiliki senyawa aktivitas sebagai imunomodulator dalam menghambat SARS-CoV-2 secara studi *in silico*.

**Kata Kunci:** *FAB- Antibody, In Silico, Kuersetin, Mirisetin, SARS-CoV-2.*

#### Abstract

In finding for preventive treatment of pathogenic SARS-CoV-2 virus is an important need today. Although an emergency vaccine has been found, isn't enough to take significant precautions. So the purpose of this study is to identify flavonoid compounds namely quercetine and myricetine are suspected to have activity as immunomodulators in inhibiting SARS-CoV-2 virus using studies in *in silico*. Samples of 3D structure compounds from PubChem with 3D protein structure *Fab-Antibody* in *docking* using *AutodockTools* and *SwissDock* are then validated by performing *Molecular Dynamic*. The final result of conformation is then visualized using *Biovia Discovery studio* analyzed the effectiveness of *docking* programs, pharmacokinetics, toxicity and dynamic programs with *Ramachandran* plots. From the results of *docking* using *swissdock* known quercetine compounds have good activity with 7KZA receptors with a value of  $\Delta G$  -8.22 and *docking* results with *AutodockTools* is 7JMO receptors with  $\Delta G$  of -7.66. *Molecular Dynamic* continued to interact well on 7KZA receptors with *disallowed religion* of 0.94% and *favoured region* of 87.264%. While in the *docking* results myricetine compounds with *AutodockTools* and *SwissDock* have similar interactions with both proteins 7B30 with each -  $\Delta G$  values of -7.55 and -8.39, and validated with molecular dynamic results have a stable bond on the receptor 7B30 also with *disallowed religion* of 4.5% and *most favored region* of 84.456%. Quercetine and myricetine test compounds have the potential to have activity compounds as immunomodulators in inhibiting SARS-CoV-2 in *in silico* studies.

**Key word :** *FAB- Antibody, In Silico, Myricetine, Quercetine, SARS-CoV-2.*