

**IDENTIFIKASI DAN PENILAIAN KEAMANAN SENYAWA
OBAT AZITHROMYCIN, CLARITHROMYCIN,
CHLOROQUIN, DOXYCYCLIN DAN
HYDROXYCHLOROQUIN TERHADAP PROTEASE UTAMA
UNTUK SARS-COV-2: STUDI *IN SILICO***

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat guna menempuh gelar
Sarjana Farmasi Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada**

**RIKA RAHMAWATI
31117136**



**PROGRAM STUDI S1-FARMASI
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN BAKTI TUNAS
HUSADA TASIKMALAYA
2021**

ABSTRAK

Identifikasi dan Penilaian Keamanan Senyawa Obat Azithromycin, Clarithromycin, Chloroquin, Doxycyclin dan Hydroxychloroquin Terhadap Protease Utama untuk SARS-CoV-2: Studi *In Silico*

Rika Rahmawati

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

ABSTRACT

Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) is a disease that spreads very rapidly. Identifying effective antiviral drugs is urgently needed. So the purpose of this study was to identify the binding performance and safety of drug compounds Azithromycin, clarithromycin, doxycycline, chloroquine and hydroxychloroquine which are known to have potential as antivirals using *in silico* studies so that the most effective potential for this SARS-CoV-2 agent can be determined. The five compounds were analyzed for toxicity using Toxtree, docking with the main viral protease (Mpro) using AutodockTools, and Molecular Dynamic. The results showed that azithromycin compounds had good binding to the Mpro receptor (ID: 5RGW) with an G value of -1941 kcal/mol. Based on the results of Molecular Dynamic, azithromycin compounds have a stable interaction seen from the results of the procheck Ramachandran disallowed region and most favored region plots with conditions <15% and >50%, respectively. The results of the toxicity test showed that azithromycin compounds had low toxicity. It can be concluded that the drug compound azithromycin has the best effectiveness as a potential agent for SARS-Cov-2.

Keywords: Antiviral, Main Protease, Molecular Docking, Molecular Dynamic.

ABSTRAK

Severe Acute Respiratory Syndrom Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) adalah penyakit yang menyebar sangat pesat. Mengidentifikasi obat antivirus yang efektif sangat dibutuhkan. Maka tujuan penelitian ini melakukan identifikasi kinerja pengikatan dan keamanan senyawa obat Azithromycin, clarithromycin, doxycycline, chloroquin dan hydroxychloroquin yang diketahui memiliki potensi sebagai antivirus menggunakan studi *in silico* sehingga dapat diketahui potensi obat yang paling efektif untuk agen SARS-CoV-2 ini. Kelima senyawa dianalisis toksisitas menggunakan *Toxtree*, *docking* dengan protease utama virus (Mpro) menggunakan *AutodockTools*, dan *Molecular Dynamic*. Hasil temuan menunjukkan senyawa azithromycin memiliki ikatan yang baik dengan reseptor Mpro (ID: 5RGW) dengan nilai ΔG sebesar -19.41 kkal/mol. Berdasarkan hasil *Molecular Dynamic* senyawa azithromycin memiliki interaksi yang stabil dilihat dari hasil *procheck* plot ramachandran *dissalowed region* dan *most favored region* dengan syarat masing-masing <15% dan >50%. Hasil uji toksisitas menunjukkan senyawa azithromycin memiliki toksisitas yang rendah. Dapat disimpulkan bahwa senyawa obat azithromycin memiliki efektifitas paling baik dapat berpotensi sebagai agen SARS-Cov-2.

Kata Kunci: Antivirus, *Main Protease*, *Molecular Docking*, *Molecular Dynamic*.