

**PENAMBATAN MOLEKULAR SENYAWA ANTIVIRUS PADA  
RESEPTOR *SPIKE* PROTEIN SEBAGAI AGEN TERAPEUTIK  
COVID-19**

**SKRIPSI**

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana  
pada Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada

**SOPHIA DENA**

**31117046**



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

## ABSTRAK

### Penambatan Molekular Senyawa Antivirus pada Reseptor *Spike* Protein sebagai Agen Terapeutik COVID-19

Sophia Dena

S1 Farmasi, Sekolah Tinggi Ilmu Kesehatan Bakti Tunas Husada

#### Abstrak

Penambatan molekular senyawa antivirus pada reseptor *Spike* Protein sebagai agen terapeutik COVID-19 telah berhasil dilakukan dengan menggunakan metode *molecular docking*. *Spike* Protein menjadi target dalam pengembangan antivirus terhadap SARS-CoV-2, karena pada daerah *Spike* Protein ini cenderung bermutasi. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui interaksi penambatan molekular antara ligan antivirus dengan reseptor *Spike* Protein seperti ikatan hidrogen, ikatan hidrofobik, residu asam amino, dan nilai *binding energy*. Senyawa antivirus yang digunakan antara lain remdesivir, oseltamivir, lopinavir, ritonavir, favipiravir, ribavirin, umifenovir, hidroksiklorokuin, dan klorokuin. Sedangkan reseptor yang digunakan antara lain 6LZG, 6M0J, 6VW1, 6YLA, 7BZ5, dan 7LOP. Metode *docking* pada penelitian ini menggunakan perangkat lunak AutoDock Tools 1.5.6 dan visualisasi hasil *docking* menggunakan perangkat lunak Discovery Studio Visualizer v20. Hasil analisis *docking* menunjukkan senyawa remdesivir yang memiliki nilai *binding energy* paling rendah dibandingkan senyawa lain yaitu sebesar -7,60kcal/mol pada kode reseptor 6M0J. Maka dapat diprediksi bahwa senyawa remdesivir memiliki interaksi yang stabil dan efektifitas yang lebih baik sehingga dapat dijadikan sebagai kandidat pengobatan COVID-19.

**Kata kunci:** *Molecular Docking*, COVID-19, antivirus, *Spike* Protein, Remdesivir.

#### Abstract

*Molecular docking compounds antiviral on receptors Spike Protein as an agent teurapeutik COVID-19 has succeeded is conducted by using the method molecular. Spike proteins into a target in antiviral development to sars-cov-2, because in the spike this protein tending to mutated. The study aimed to identify the interaction between ligand molecular docking antiviral receptor Spike Protein such as hydrogen bonds, the hydrophobic, amino acid residues, and the value of binding energy. A compound that in use among other remdesivir antiviral, oseltamivir, lopinavir, ritonavir, favipiravir, ribavirin, umifenovir, hidroxychloroquine, and chloroquine. While receptors used between other 6LZG, 6M0J, 6VW1, 6YLA, 7BZ5, and 7LOP. A method of docking on this research using software AutoDock 1.5.6 Tools and visualisation the results of docking using software Discovery Studio Visualizer v20. The analysis docking denoting the compounds remdesivir partook of binding energy the lowest of another compound which is -7,60kcal/mole on codes 6M0J receptors. So predictable that compound remdesivir having interaction with the effectiveness of the best that can be used as a candidate COVID-19 treatment.*

**Keywords:** *Molecular Docking*, COVID-19, Antiviral, *Spike* Protein, Remdesivir.