

**SKRINING VIRTUAL SENYAWA ALKALOID SEBAGAI  
INHIBITOR *MAIN PROTEASE*, *RNA-DEPENDENT RNA*  
*POLYMERASE* DAN *ANGIOTENSIN CONVERTING ENZYME 2*  
PADA COVID-19**

**SKRIPSI**

**PUJI AINUL HAPID  
31117035**



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
STIKes BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA**

**2021**

## ABSTRAK

### **Skrining Virtual Senyawa Alkaloid sebagai Inhibitor *Main Protease*, *RNA -Dependent RNA Polymerase* dan *Angiotensin Converting Enzyme 2* pada Covid-19**

**Puji Ainul Hapid**

S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada

#### **Abstrak**

Penyebaran infeksi SARS-CoV2 penyebab COVID-19 secara global masih mengalami peningkatan hingga saat ini. Peningkatan tersebut ditentukan oleh aktivitas *main protease* dan *RNA-dependent RNA polymerase* sebagai fasilitator replikasi ssRNA SARS-CoV2. Selain itu, interaksi protein spike dengan reseptor *angiotensin converting enzyme 2* menyebabkan SARS-CoV2 dapat melewati membrane sel. Senyawa alkaloid memiliki aktivitas sebagai agen antivirus yang mampu menghambat proses replikasi ssRNA SARS-Cov2. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan senyawa alkaloid sebagai kandidat potensial pengobatan COVID-19. Metode yang digunakan ialah virtual screening dengan *molecular docking* dan *molecular dynamics* serta prediksi profil farmakokinetik dan toksisitas. Hasil screening alkaloid menunjukkan senyawa hupehenine memiliki interaksi terhadap *main protease*, senyawa yubeinine memiliki interaksi terhadap *RNA-dependent RNA polymerase* dan senyawa aloperin memiliki interaksi terhadap *angiotensin converting enziyme 2* dilihat dari energi bebas Gibbs ( $\Delta G$ ) yang dihasilkan yaitu -10.44 kkal/mol, -8.72 kkal/mol dan -4.08 kkal/mol secara berurutan. Pada *molecular dynamics* diperoleh bahwa senyawa yubeinine memiliki nilai energi total dari metode MMGBSA yang lebih kecil dari pembanding yaitu sebesar -55.9563 kkal/mol sehingga dijadikan sebagai senyawa kandidat pengobatan COVID-19. Senyawa yubeinine yang diperoleh memiliki absorpsi, distribusi dan metabolisme yang baik akan tetapi memiliki sifat mutagenik.

**Kata kunci:** COVID-19, *main protease*, *RNA-dependent RNA polymerase*, *angiotensin converting enziyme 2*, skrining virtual, alkaloid.

#### **Abstract**

*The causes COVID-19 of SARS-CoV2 infection still rise until now today. This increase caused by the activity of main protease and RNA-dependent RNA polymerase as facilitator of ssRNA replication. In addition, the interaction of the spike protein with the angiotensin converting enzyme 2 receptor allows SARS-CoV2 pass through to cell membranes. Alkaloid compound have activity as antiviral agents wich hold up the replication process of ssRNA SARS-CoV2. This study aims to obtain alkaloid compounds as potential candidates for the treatment of COVID-19. The method used is virtual screening with molecular docking and molecular dynamics as well as prediction of pharmacokinetic and toxicity. The results of alkaloid screening showed that hupehenine had interactions with main proteases, yubeinine with RNA-dependent RNA polymerase and aloperin with angiotensin converting enzyme 2 by Gibbs free energy ( $\Delta G$ ) produced were -10.44, -8.72 and -4.08 sequentially. In molecular dynamics, yubeinine compound has a total energy of MM-GBSA as -55.9563 which smaller than the comparison that considered as a candidate compound for COVID-19. Yubeinine compound obtained has good absorption, distribution and metabolism but mutagenic properties.*

**Keywords:** COVID-19, *main protease*, *RNA-dependent RNA polymerase*, *angiotensin converting enziyme 2*, virtual screening, alkaloid.