

**PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS POTENSIAL
SEBAGAI OBAT ANTICOID-19 PADA RESEPTOR
2'-O-METHYLTRANSFERASE**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana

Program Studi S-1 Farmasi

STIKes Bakti Tunas Husada

DEVI YUSTIKA NURBAYAN

31117110



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

ABSTRAK

PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS POTENSIAL SEBAGAI OBAT ANTICOVID-19 PADA RESEPTOR 2'-O-METHYLTRANSFERASE

Devi Yustika Nurbayan

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

Telah dilakukan penelitian mengenai studi *in silico* senyawa antivirus terhadap reseptor 2'-*O-methyltransferase* (nsp 16). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui energi ikatan, jenis ikatan dan jarak ikatan dari interaksi terbaik antara reseptor 2'-*O-methyltransferase* dengan ligan antivirus berdasarkan hasil studi *molecular docking*. Metode *molecular docking* dilakukan dengan mempersiapkan reseptor menggunakan program *AutoDock Tools* dan *Molegro Molecular View*, mempersiapkan ligan menggunakan program *Marvin Sketch*, validasi metode dan *docking* dengan 2'-*O-methyltransferase* menggunakan program *AutoDock Tools* dan hasil *docking* divisualisasi dalam bentuk 2D dan 3D menggunakan program *Biovia Discovery Studio Visualizer*. Analisis hasil *docking* menunjukkan bahwa ligan uji yang memiliki nilai ΔG lebih rendah dibandingkan *native ligand* diantaranya yaitu reseptor 6WVN dengan lopinavir sebesar -17,64 kkal/mol, 6W75 dengan lopinavir sebesar -18,57 kkal/mol, 6WJT dengan lopinavir sebesar -17,45 kkal/mol, 6W61 dengan ritonavir sebesar -17,72 kkal/mol, 6WKQ dengan ritonavir sebesar -18,65 kkal/mol dan 6YZ1 dengan ritonavir sebesar -16,92 kkal/mol. Bila diurutkan, interaksi yang memiliki ΔG paling rendah adalah ligan uji ritonavir dengan reseptor 6WKQ sebesar -18,65 kkal/mol, sehingga paling berpotensi sebagai inhibitor 2'-*O-methyltransferase*. Berdasarkan *molecular docking*, pada interaksi senyawa ritonavir dengan 6WKQ terdapat jenis ikatan 15 interaksi van der waals, ikatan hidrogen konvensional sebanyak 2 interaksi dengan masing - masing jarak ikatan 2,53 Å dan 2,01 Å dan 1 ikatan hidrogen karbon, 3 Pi-Alkil, 3 Pi-Sulfur dan 1 interaksi Pi-lone pair.

Kata kunci: Penambatan Molekul, Anti-Covid-19, Antivirus, 2'-*O-methyltransferase*, NSP16

ABSTRACT

The previous researches have been carried out on in silico studies of antiviral compounds against the 2'-O-methyltransferase (nsp 16) receptor. The present study aimed to determine the binding energy, type of bond and bond distance of the best interaction between the 2'-O-methyltransferase receptor and antiviral ligand based on the results of molecular docking studies. The molecular docking method was carried out by preparing the receptor using the AutoDock Tools program and Molegro Molecular View, preparing ligand using Marvin Sketch program and preparing method validation and docking with 2'-O-methyltransferase using the AutoDock Tools program. Then, the docking results were visualized in 2D and 3D using Biovia Discovery Studio Visualizer program. The results of docking analysis showed that test ligand which had lower ΔG values than native ligands were 6WVN receptor with lopinavir at -17.64 kcal/mol, 6W75 with lopinavir at -18.57 kcal/mol, 6WJT with lopinavir at -17.45 kcal/mol, 6W61 with ritonavir at -17.72 kcal/mol, 6WKQ with ritonavir at -18.65 kcal/mol and 6YZ1 with ritonavir at -16.92 kcal/mol. If sorted, the interaction that has lowest G was ritonavir test ligand with the 6WKQ receptor at -18.65 kcal/mol, then it has the most potential as a 2'-O-methyltransferase inhibitor. Based on molecular docking, in ritonavir interaction with 6WKQ there were 15 types of van der Waals interactions, conventional hydrogen bonds as much as 2 interactions with a bond distance of 2.53 and 2.01 and 1 carbon hydrogen bond, 3 Pi-Alkyl, 3 Pi-Sulfur and 1 Pi-lone pair interaction.

Key Words: Molecular Docking, Anti-Covid-19, Antivirus, 2'-*O-methyltransferase*, NSP16