

**VIRTUAL SKRINING SENYAWA TURUNAN FLAVONOID  
TERHADAP RESEPTOR MAIN PROTEASE, RNA DEFENDANT RNA  
POLYMERASE dan ANGIOTENSIN CONVERTING ENZIM-2 PADA  
COVID-19**

**SKRIPSI**

Diajukan sebagai salah satu syarat memperoleh Gelar Sarjana pada Program  
Studi S1 Farmasi

**ADHITYA ALIF PRATAMA  
31117001**



**STIKes BHAKTI TUNAS HUSADA  
PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
KOTA TASIKMALAYA  
2021**

## ABSTRAK

Secara umum, SARS-CoV-2 adalah virus RNA untai positif, replikasinya di pengaruhi oleh transkripsi multi-subunit kompleks protein non structural dengan panjang 30.000 bp, dan termasuk ke dalam *family Coronaviridae* dan genus *Betacoronavirus*, yang sangat mirip dengan SARS-CoV. Virtual skrining dilakukan dengan melakukan *docking* dengan menggunakan program *Autodock* pada perangkat lunak PyRx-phyton 0.8, lalu dilakukan penambatan molecular dinamik dengan menggunakan *AmberTools*. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui senyawa turunan flavonoid manakah yang mempunyai interaksi yang stabil dengan reseptor pada Covid-19. Hasil virtual skrining terbaik reseptor RdRp dengan kode pdb 7CTT adalah senyawa morusin dengan nilai energi Gibbs ( $\Delta G$ ) sebesar -7,42 kkal/mol dan konstanta inhibisinya sebesar  $12.89 \times 10^{-3} \mu\text{m}$ , lalu pada reseptor Main Protease dengan kode pdb 6ZRU adalah senyawa 3'\_methoxypuearin dengan nilai energi Gibbs ( $\Delta G$ ) sebesar -7,17 kkal/mol dan konstanta inhibisi sebesar  $0.904 \mu\text{m}$ , , pada reseptor ACE-2 dengan kode pdb 6LZG adalah senyawa noreugenin dengan nilai energi bebas Gibbs ( $\Delta G$ ) sebesar -1.99 kkal/mol.

**Kata kunci:** *Covid-19, Reseptor, Docking, binding affinity, Dinamika Molekul.*

## **ABSTRACT**

*SARS-CoV-2 is the virus RNA strand positive, replicating in influenced by the transcription of a multi-subunit complex of proteins non-structural with a length of 30,000 bp, and included into the family Coronaviridae and genus Betacoronavirus, which is very similar to SARS-CoV. Virtual screening is done to perform docking with using the program Autodock on the device software PyRx –python 0.8, then do belay molecular dynamics by using AmberTools. The purpose of the study is to determine a compound-derived flavonoid Where are having interactions are stabilized by receptors on Covid-19. The best virtual results of screening RdRp. receptors with code pdb 7CTT is a compound morusin the value of energy Gibbs ( $\Delta G$ ) amounted to -7.42 kcal / mol and constant inhibition for  $1.289 \times 10^{-3} \mu\text{m}$ , and the receptor Main Protease by code pdb 6ZRU is a compound 3'\_methoxypuearin by value energy Gibbs ( $\Delta G$ ) amounted to -7.17 kcal / mol and constant inhibition of  $0.904 \mu\text{m}$ , , the receptor ACE-2 with code pdb 6LZG is a compound noreugenin with the value of energy-free Gibbs ( $\Delta G$ ) amounted to -1.99 kcal / mol.*

**Keywords:** Covid-19, Receptors, Docking, Binding affinity, Molecular Dynamics..