

**PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS POTENSIAL
SEBAGAI ANTI-COVID-19 PADA RESEPTOR NSP3
MACRODOMAIN**

SKRIPSI

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

AMELYA DWI CAHYANI

31117103



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

2021

ABSTRAK

Penambatan Senyawa Antivirus Potensial sebagai Anti-Covid-19 pada Reseptor NSP3 *Macrodomain*

Amelya Dwi Cahyani

Program Studi S1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Covid-19 dinyatakan sebagai pandemi global dan hampir menyerang semua negara di dunia. Penyebab Covid-19 yaitu SARS-CoV-2 yang memiliki kemampuan penyebaran sangat mudah. Berdasarkan data dari WHO sampai 30 Mei 2021 terdapat 169.597.415 kasus Covid-19 yang terkonfirmasi termasuk 3.530.582 kematian. Reseptor NSP3 *Macrodomain* merupakan salah satu reseptor Covid-19 yang berperan dalam replikasi virus dan penurunan imun inang. Favipiravir, Hidroksiklorokuin, Klorokuin, Lopinavir, Oseltamivir, Remdesivir, Ribavirin, Ritonavir, dan Umifenovir telah diketahui memiliki aktivitas sebagai antivirus sehingga untuk menambah informasi tentang kemampuan 9 senyawa antivirus tersebut sebagai ligan anti-Covid-19 pada reseptor NSP3 *Macrodomain* maka dilakukan uji *in silico* terhadap reseptor NSP3 *Macrodomain*. Pada penelitian ini dilakukan *molecular docking* 9 senyawa antivirus terhadap reseptor NSP3 *Macrodomain* dengan menggunakan *software AutoDock Tools 1.5.6*. Terdapat 5 kode PDB dari reseptor NSP3 *Macrodomain* yang valid digunakan pada metode *docking* yang digunakan dalam penelitian ini diantaranya kode PDB 6W6Y, 6WCF, 6Z5T, 7JME, dan 7KG3. Masing-masing kode PDB tersebut memiliki ligan alami yang kemudian dipisahkan menggunakan *Molegro Molecular Viewer*. Pengamatan visual interaksi 9 senyawa antivirus dengan reseptor NSP3 *Macrodomain* dilakukan dengan menggunakan *Discovery Studio Visualizer*. Hasil dari penelitian ini adalah ligan uji (senyawa antivirus) hampir seluruhnya memiliki aktivitas antivirus yang lebih baik daripada ligan alami dari masing-masing kode PDB reseptor NSP3 *Macrodomain*, kecuali lopinavir pada 6WCF dan favipiravir pada 7JME. Hal ini dilihat dari nilai *binding energy*, dimana semakin kecil nilai *binding energy* maka afinitasnya semakin besar. Senyawa yang memiliki nilai *binding energy* terendah (afinitas terbaik) yaitu umifenovir pada kode PDB 6W6Y, 6WCF, 6Z5T serta ritonavir pada 7JME dan 7KG3.

Kata Kunci : *In Silico*, Anti-Covid-19, *Molecular Docking*, NSP3 *Macrodomain*.

ABSTRACT

Potential Antiviral Compound Tethering as Anti-Covid-19 on NSP3 Macrodmain Receptor

Amelya Dwi Cahyani

Pharmacy Study Program, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstract

Covid-19 is declared a global pandemic and affects almost all countries in the world. The cause of Covid-19 is SARS-CoV-2 which has very easy spread. Based on data from WHO until May 30, 2021 there are 169.597.415 confirmed cases of Covid-19 including 3.530.582 deaths. The NSP3 Macrodmain receptor is one of the Covid-19 receptors that plays a role in virus replication and decreased host immunity. Favipiravir, Hydroxychloroquine, Chloroquine, Lopinavir, Oseltamivir, Remdesivir, Ribavirin, Ritonavir, and Umifenovir have been known to have antiviral activity so to add information about the ability of these 9 antiviral compounds as anti-Covid-19 ligands at NSP3 Macrodmain receptors, an in silico test was conducted. In this study, the molecular docking of 9 antiviral compounds was carried out against the NSP3 Macrodmain receptor using AutoDock Tools 1.5.6 software. There are 5 PDB codes from the NSP3 Macrodmain receptor which are valid for the docking method used in this study including the PDB code 6W6Y, 6WCF, 6Z5T, 7JME, and 7KG3. Each PDB code has a natural ligand which is then separated using the Molegro Molecular Viewer. Visual observation of the interaction of 9 antiviral compounds with the NSP3 Macrodmain receptor was carried out using the Discovery Studio Visualizer. The results of this study were that almost all of the test ligands (antiviral compounds) had better antiviral activity than the natural ligands in the PDB codes of NSP3 Macrodmain receptor, except for lopinavir at 6WCF and favipiravir at 7JME. This can be seen from the binding energy value, the smaller the binding energy value, the greater the affinity. Antiviral compounds that have the lowest binding energy value (best affinity) are umifenovir at PDB code 6W6Y, 6WCF, 6Z5T and ritonavir at 7JME and 7KG3.

Keyword : In Silico, Anti-Covid-19, Molecular Docking, NSP3 Macrodmain.