

**PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS
SEBAGAI ANTI COVID-19
PADA RESEPTOR NON STRUKTURAL PROTEIN-15**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

ANNISA NUR FITRIANI

31117107



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

**PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS
SEBAGAI ANTI COVID-19
PADA RESEPTOR NON STRUKTURAL PROTEIN-15**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

ANNISA NUR FITRIANI

31117107

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

ABSTRAK

Penambatan Senyawa Antivirus Sebagai Anti Covid-19 Pada Reseptor Non Struktural Protein-15

Annisa Nur Fitriani

Departemen Farmakokimia, Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya, Jl. Cilolohan No. 36, 46115, Tasikmalaya, Indonesia

Email: annisanurf99@gmail.com

Abstrak

Severe Acute Respiratory Syndrome-Corona Virus-2 atau SARS-CoV-2 merupakan virus korona jenis baru yang dilaporkan berasal dari Pasar *Seafood* di Wuhan, China Selatan yang menyebabkan *Corona Virus Disease-19* (Covid-19). Tujuan dari penelitian ini adalah bagaimana potensi senyawa antivirus sebagai kandidat untuk melawan SARS-CoV-2 pada reseptor NSP15 dan senyawa antivirus mana yang mempunyai nilai afinitas ikatan terbaik diantara sembilan senyawa uji yang diujikan menggunakan metode penambatan molekul. Telah dilakukan desain terhadap 9 senyawa antivirus diantaranya favipiravir, hidroksiklorokuin, klorokuin, lopinavir, oseltamivir, remdesivir, ribavirin, ritonavir dan umifenovir dengan reseptor NSP15. Proses docking menggunakan perangkat lunak *AutodockTools-1.5.6*. penerapan aturan *Lipinski's Rule of Five* menggunakan *Marvin Sketch 5.2*. Hasil docking senyawa antivirus dengan reseptor NSP15 menurut aturan *Lipinski's* diperoleh bahwa hidroksiklorokuin, klorokuin, oseltamivir dan ribavirin memenuhi kriteria. Pada reseptor 5S71 tidak ditemukan ligan uji yang mempunyai nilai energi bebas lebih kecil dibanding ligan alami, sedangkan pada reseptor 6W01 senyawa yang memenuhi syarat mulai dari energi bebas terkecil yaitu lopinavir (-8,65 kka/mol), umifenovir (-7,26 kka/mol), ritonavir (-6,69 kka/mol), remdesivir (-6,46 kka/mol), ribavirin (-6,45 kka/mol), klorokuin (-6,32 kka/mol) dan hidroksiklorokuin -6,27 kka/mol). Sehingga dapat disimpulkan berdasarkan *binding affinity* dan aturan *Lipinski's* bahwa senyawa ribavirin 6W01 berpotensi untuk dijadikan sebagai kandidat obat anti Covid-19.

Kata kunci: SARS-CoV-2, Anti-Covid-19, Penambatan Molekuler, NSP 15

Abstract

Severe Acute Respiratory Syndrome-Corona Virus-2 or SARS-CoV-2 is a new type of corona virus reported from the Seafood Market in Wuhan, South China that causes Corona Virus Disease-19 (Covid-19). The results of this study are how the potential of antiviral compounds as candidates against SARS-CoV-2 at the NSP15 receptor target and which antiviral compounds have the best affinity values among the nine compounds tested using the molecular tethering method. Nine antiviral compounds have been designed including favipiravir, hydroxychloroquine, chloroquine, lopinavir, oseltamivir, remdesivir, ribavirin, ritonavir and umifenovir with NSP15 receptors. Docking process using AutodockTools-1.5.6 software. application of Lipinski's Rule of Five using Marvin Sketch 5.2. The results of docking antiviral compounds with the NSP15 receptor according to Lipinski's rules showed that hydroxychloroquine, chloroquine, oseltamivir and ribavirin met the criteria. At the 5S71 receptor, no test ligand was found which had a free energy value smaller than the natural ligand, while at the 6W01 receptor, compounds that met the requirements starting from the lowest free energy were lopinavir (-8.65 kka/mol), umifenovir (-7.26 kka /mol), ritonavir (-6.69 kka/mol), remdesivir (-6.46 kka/mol), ribavirin (-6.45 kka/mol), chloroquine (-6.32 kka/mol) and hydroxychloroquine -6.27 kka/mol). So it can be said based on Lipinski's affinity and rules that the compound ribavirin 6W01 can be used as an anti-Covid-19 drug candidate.

Keywords: SARS-CoV-2, Anti-Covid-19, Molecular Docking, NSP 15