

**PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS
PADA RESEPTOR NSP-13
DALAM PENGEMBANGAN TERAPI COVID-19**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana pada
Program Studi S-1 Farmasi

ALICIA NADIRA DESMOONDA

31117101



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

2021

**PENAMBATAN SENYAWA ANTIVIRUS
PADA RESEPTOR NSP-13
DALAM PENGEMBANGAN TERAPI COVID-19**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana pada
Program Studi S-1 Farmasi

ALICIA NADIRA DESMOONDA

31117101

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

ABSTRAK

Penambatan Senyawa Antivirus Pada Reseptor NSP-13 Dalam Pengembangan Terapi COVID-19

Alicia Nadira Desmoonda

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

Email: alicianadiradesmoonda@gmail.com

Abstrak

Crona Virus Disease 2019 (COVID-19) merupakan penyakit yang disebabkan oleh *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2)*. Virus SARS-CoV-2 menyebar dengan cepat dan menimbulkan angka kematian yang tinggi. Pada tanggal 18 Desember 2019 jumlah kasus terkonfirmasi COVID-19 di dunia sebanyak 72.851.747 jiwa, sedangkan jumlah kematian sebanyak 1.643.339 orang. Penelitian kali ini bertujuan untuk mengetahui potensi dan nilai afinitas ikatan terbaik antara senyawa obat antivirus terhadap SARS-CoV-2 pada reseptor NSP-13 dengan metode *Docking Molecular. Non-struktural protein-13* merupakan salah satu reseptor SARS-CoV-2 yang berperan dalam replikasi genom virus dan senyawa antivirus yang diujikan diantaranya klorokuin, favipiravir, hidrosiklorokuin, lopinavir, ribavirin, ritonavir, remdesivir, oseltamivir dan umifenovir. Metode *Docking Molecular* dilakukan dengan menginteraksikan SARS-CoV-2 reseptor NSP-13 dengan ligan uji senyawa antivirus secara komputansi. *Docking Molecular* menggunakan *software AutoDockTools* dan pemisahan ligan alami dengan reseptor menggunakan *software Molegro Molecular Viewer*. Dari penelitian kali ini semua senyawa memiliki *nilai binding affinity* lebih rendah dari ligan alaminya kecuali senyawa obat favipiravir, senyawa obat yang memenuhi aturan *Lipinski's Rule of Five* yaitu hidrosiklorokuin, klorokuin, oseltamivir dan ribavirin dan ikatan hidrogen didapatkan hasil senyawa terbaik adalah oseltamivir pada kode pdb 5RMJ.

Kata kunci: *In Silico, Molecular Docking, Covid-19, antivirus, Non Structural Protein-13, oseltamivir*

Abstract

Corona Virus Disease 2019 (COVID-19) is a disease caused by *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2)*. The SARS-CoV-2 virus spreads rapidly and causes a high mortality rate. On December 18, 2019 the number of confirmed cases of COVID-19 in the world was 72,851,747 people, while the number of deaths was 1,643,339 people. This study aims to determine the potential and the best binding affinity between antiviral drug compounds against SARS-CoV-2 at the NSP-13 receptor using the Molecular Docking method. Non-structural protein-13 is one of the SARS-CoV-2 receptors that play a role in viral genome replication and the tested antiviral compounds including chloroquine, favipiravir, hydroxychloroquine, lopinavir, ribavirin, ritonavir, remdesivir, oseltamivir and umifenovir. Molecular Docking Method was done by interacting the SARS-CoV-2 receptor NSP-13 with the test ligands for antiviral compounds in a computational way. Molecular docking using AutoDockTools software and separation of natural ligands from receptors using Molegro Molecular Viewer software. From this research, all compounds have binding affinity values lower than their natural ligands except for the drug compound favipiravir, the drug compound that complies with Lipinski's Rule of Five rules, namely hydroxychloroquine, chloroquine, oseltamivir and ribavirin and hydrogen bonding, the best compound results are oseltamivir with a pdb code of 5RMJ.

Keywords: *In Silico, Molecular Docking, Covid-19, antiviral, Non Structural Protein-13, oseltamivir*