

**POTENSI KOMPONEN SENYAWA YANG TERKANDUNG
DALAM BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* L.) SEBAGAI
ANTI SARS-COV-2 : STUDI IN SILICO**

SKRIPSI



**QISYA APRIA DEWI
31118099**

**PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

**POTENSI KOMPONEN SENYAWA YANG TERKANDUNG
DALAM BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* L.) SEBAGAI ANTI
SARS-COV-2 : STUDI IN SILICO**

SKRIPSI

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



**QISYA APRIA DEWI
31118099**

**FAKULTAS FARMASI
PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

ABSTRAK

Potensi Komponen Senyawa Yang Terkandung Dalam Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L.) Sebagai Anti Sars-Cov-2 : Studi In Silico

Qisya Apria Dewi

S1-Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Coronavirus atau *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus type 2* (SARS-CoV-2), telah meyebar diseluruh dunia. Bunga telang (*Clitoria ternatea* L.) diyakini memiliki aktivitas antiviral karena mampu menghambat *metalloproteinase* (ADAM17) yang terlibat dalam penghancuran ACE. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui adanya interaksi antara reseptor 5R7Y, 7JKV, 7TLL dan 7VH8 dengan komponen senyawa yang terkandung dalam bunga telang menggunakan metode *molecular docking* dan *molecular dynamic*. Proses *docking* dilakukan menggunakan *software PLANTS*. Hasil *docking* menunjukkan senyawa Stigmast-4-ene-3,6-dione dan Senyawa Kaempferol-3-O-rutinosida memiliki skor docking berturut-turut sebesar -87,16 dan -85,28, lebih rendah dari *native* ligan 5R7Y dan ligan pembanding favipiravir dan molnupiravir tetapi lebih tinggi dibanding *native* ligan 7JKV, 7TLL, dan 7VH8. Simulasi *molecular dynamic* melalui *google colab* dilakukan terhadap senyawa Stigmast-4-ene-3,6-dione dengan reseptor 5R7Y memiliki nilai rata-rata RMSD dan RMSF, yaitu 1,39 Å dan 0,87 Å, sedangkan senyawa Kaempferol-3-O-rutinosida dengan reseptor 7JKV, 7TLL dan 7VH8 memiliki nilai rata-rata RMSD sebesar 1,96 Å; 1,72 Å dan 1,23 Å. Nilai RMSF sebesar 1,21 Å; 0,91 Å: dan 0,88 Å. Sehingga dapat disimpulkan bahwa senyawa tersebut memiliki potensi sebagai anti SARS-CoV-2.

Kata kunci : SARS-CoV-2, Bunga Telang, *Clitoria ternatea* L., In Silico, Molecular Dynamic

Abstract

Coronavirus or Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus type 2 (SARS-CoV-2), has spread throughout the world. *Bunga telang* (*Clitoria ternatea* L.) is believed to have antiviral activity because it is able to inhibit *metalloproteinase* (ADAM17) involved in the destruction of ACE. The purpose of this study is to determine the interaction between the 5R7Y, 7JKV, 7TLL and 7VH8 receptors with the compound components contained in telang flowers using *molecular docking* and *molecular dynamic* methods. The docking process is carried out using *software PLANTS*. Docking results showed that *stigmast-4-ene-3,6-dione* compounds and *Kaempferol-3-O-rutinosida* compounds had successive docking score values of -87.16 and -85.28, more low of *native* 5R7Y ligands and comparative ligands of favipiravir and molnupiravir but higher than *native* ligands of 7JKV, 7TLL, and 7VH8. Simulation of *molecular dynamic* through *google colab* was carried out on *stigmast-4-ene-3,6-dione* with 5R7Y receptors having average values of RMSD and RMSF, namely 1.39 Å and 0.87 Å, while *kaempferol-3-O-rutinoside* compounds with receptors 7JKV, 7TLL and 7VH8 had an average RMSD value of 1.96 Å; 1.72 Å and 1.23 Å. RMSF values of 1.2164 Å; 0.91 Å: and 0.88 Å. So, it can be concluded that the compound has the potential to be anti-SARS-CoV-2.

Keywords : SARS-CoV-2, Butterfly Pea, *Clitoria ternatea* L., In Silico, Molecular Dynamic