

**STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava L.*)
SEBAGAI KANDIDAT ANTI SARS-CoV-2**

SKRIPSI



**SITI NUR KASYIFA
31118074**

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

**STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava L.*)
SEBAGAI KANDIDAT ANTI SARS-CoV-2**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi



**SITI NUR KASYIFA
31118074**

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

ABSTRAK

STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN JAMBU BIJI (*Psidium guajava L.*) SEBAGAI KANDIDAT ANTI SARS-CoV-2

Siti Nur Kasyifa

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) muncul pertama kali di akhir tahun 2019 pada wilayah Wuhan China yang menyebabkan terjadinya sindrom pernapasan yang akut parah dan kini tersebar di seluruh dunia termasuk negara Indonesia. Berdasarkan penelitian sebelumnya, daun jambu biji terbukti mempunyai aktivitas farmakologi yaitu antiinflamasi, analgesik, hepatoprotektif, antimikroba, antihiperlikemik, antikanker, serta antioksidan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa pada daun jambu biji (*Psidium guajava L.*) dengan nilai afinitas yang dimiliki ialah ikatan terbaik dengan reseptor *Main protease*. Metode yang digunakan ialah studi komputasi dengan molekuler docking, simulasi dinamika molekul dan prediksi farmakokinetik dan toksisitas. Berdasarkan hasil molekuler docking menunjukkan terdapat 3 senyawa terbaik yaitu procyanidin A2 (-84,16), rutin (-84,07) dan β -sitosterol (-82,39). Selain itu, senyawa pada daun jambu biji (*Psidium guajava L.*) mempunyai interaksi lebih stabil dengan *binding affinity* lebih rendah dibandingkan dengan senyawa pembanding (Favipiravir).

Kata Kunci: SARS-CoV-2, *molecular docking*, *main protease*, Daun Jambu Biji (*Psidium guajava L.*)

Abstract

Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) first appeared at the end of 2019 in the Wuhan area of China which caused severe acute respiratory syndrome and is now spreading throughout the world, including Indonesia. Based on previous research, guava leaves have been shown to have pharmacological activities, namely anti-inflammatory, analgesic, hepatoprotective, antimicrobial, antihyperglycemic, anticancer, and antioxidant activities. The aim of this research is to know the compounds present in guava leaves (*Psidium guajava L.*) with the affinity value they have is the best binding to the *Main protease*. The methods used are computational studies with *molecular docking*, *molecular dynamics simulations* and *pharmacokinetic and toxicity predictions*. Based on the results of *molecular docking*, there were 3 best compounds, namely *procyanidin A2* (-84.16), *rutin* (-84.07) and *-sitosterol* (-82.39). In addition, the compound in guava leaves (*Psidium guajava L.*) has a more stable interaction with *binding affinity* than the comparison compound (Favipiravir).

Keywords: SARS-CoV-2, *molecular docking*, *main protease*, Guava Leaf (*Psidium guajava L.*)