

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA METABOLIT SEKUNDER
PADA TANAMAN SIRSAK (*Annona muricata* L.)
YANG BERPOTENSI SEBAGAI ANTIVIRUS COVID-19**

SKRIPSI



**RISNAWA PUJI ASTUTI
31020196**

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

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA METABOLIT SEKUNDER
PADA TANAMAN SIRSAK (*Annona muricata* L.)
YANG BERPOTENSI SEBAGAI ANTIVIRUS COVID-19**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana



**RISNAWA PUJI ASTUTI
31020196**

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

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa Metabolit Sekunder Pada Tanaman Sirsak
(*Annona muricata* L.) Yang Berpotensi Sebagai Antivirus COVID-19

Risnawa Puji Astuti

Program Studi S1-Farmasi Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) merupakan penyakit infeksi baru yang disebabkan oleh virus SARS-CoV-2. Sirsak (*Annona muricata* L.) merupakan tanaman yang mengandung metabolit sekunder dan sangat potensial untuk dikembangkan sebagai kandidat antivirus COVID-19. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui afinitas ikatan dan kestabilan pada 40 senyawa metabolit sekunder sirsak dalam menghambat reseptor Sars-CoV-2 melalui studi *in silico*. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah dengan *molecular docking*, *molecular dynamics*, prediksi ADMET dan prediksi jalur sintesis senyawa. Reseptor target yang digunakan pada penelitian ini yaitu *Main Protease* (M^{Pro}). Hasil *molecular docking* menunjukkan terdapat 1 senyawa terbaik dengan nilai *binding affinity* paling rendah pada 7TLL yaitu Murihexocin (-137,39). Hasil simulasi *molecular dynamics* menunjukkan Murihexocin pada 7TLL memiliki interaksi yang paling stabil, sehingga diprediksi dapat dijadikan kandidat antivirus yang sangat potensial dalam pengobatan COVID-19.

Kata Kunci: *in silico*, *molecular docking*, *molecular dynamics*, senyawa metabolit sekunder sirsak (*Annona muricata* L.)

Abstract

Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) is a new infectious disease caused by SARS-CoV-2 virus. Soursop (*Annona muricata* L.) is a plant that contains secondary metabolites and has the potential to be developed as an antiviral candidate for COVID-19. This study to determine the binding affinity and stability of 40 soursop secondary metabolites in inhibiting the Sars-CoV-2 receptor through an *in silico*. The method used in this research is *molecular docking*, *molecular dynamics*, prediction of ADMET and prediction of the synthesis pathway compound. The target receptor used in this study is *Main Protease* (M^{Pro}). The results of *molecular docking* showed that there was one best compound with the lowest binding affinity value in 7TLL, which is Murihexocin (-137.39).

Keywords: *in silico*, *molecular docking*, *molecular dynamics*, soursop secondary metabolites (*Annona muricata* L.)