

**STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM  
TANAMAN TAPAK DARA (*Cathranthus roseus*)  
SEBAGAI ANTI COVID-19**

**SKRIPSI**

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat guna memperoleh gelar Sarjana  
Farmasi Pada Program Studi S1 Farmasi  
Universitas Bakti Tunas Husada**



**ASTRI DWI GISTY**

**31117006**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
OKTOBER 2022**

## ABSTRAK

### STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM TANAMAN TAPAK DARA (*Cathranthus roseus*) SEBAGAI ANTI COVID-19

Astri Dwi Gisty

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

#### Abstrak

COVID-19 disebabkan oleh strain baru Coronavirus, secara resmi dinamakan sebagai *Severe Acute Respirator Syndrome-Coronavirus 2 (SARS-CoV-2)* yang dapat menyebabkan gangguan sistem pernafasan akut. Senyawa yang terkandung dalam tanaman tapak dara memiliki aktivitas sebagai antivirus. Untuk mengetahui potensi dari senyawa tapak dara dapat menggunakan metode *In Silico* dengan reseptor 5R7Y, 7JKV, 7TLL, dan 7VH8. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui senyawa aktif dari tumbuhan tapak dara (*Cathranthus roseus*) sebagai kandidat untuk melawan SARS-CoV-2 pada reseptor Mpro. Metode pada penelitian ini menggunakan PLANTS (*Protein-Ligand ANT System*), dan dilanjutkan visualisasi hasil docking menggunakan software *Discovey Studio Visualizer*. Dari analisis hasil docking menunjukkan senyawa brassinolide dan strictosidine memiliki nilai energi ikatan bebas paling rendah dibandingkan senyawa lainnya pada setiap reseptor. Pada reseptor 5R7Y senyawa yang terbaik yaitu brassinolide dengan nilai energi ikatan bebas -91,68. Dan pada reseptor 7JKV, 7TLL, dan 7VH8 senyawa yang terbaik yaitu strictosidine dengan nilai energi ikatan bebas -111,10 pada reseptor 7JKV, -100,23 pada reseptor 7TLL, dan -101,33 pada reseptor 7VH8. Maka dapat diprediksi senyawa strictosidine dan brassinolide memiliki interaksi yang stabil dan kuat serta memiliki efek yang lebih baik sehingga dapat dijadikan sebagai kandidat pengobatan Covid-19.

**Kata kunci:** Tapak Dara (*Cathranthus roseus*), *Molecular Docking*, Covid-19, Antivirus, Reseptor Mpro

### **Abstract**

*COVID-19 is caused by a new strain of Coronavirus, officially named as Severe Acute Respiratory Syndrome-Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) which can cause acute respiratory system disorders. The compounds contained in the tapak dara plant have antiviral activity. To determine the potential of the tapak dara compound, the In Silico method with 5R7Y, 7JKV, 7TLL, and 7VH8 receptors can be used. The purpose of this study was to determine the active compound from the tapak dara plant (Cathranthus roseus) as a candidate to treat SARS-CoV-22 at the Mpro receptor. The method in this study uses PLANTS (Protein-Ligand ANT System), and continued with the visualization of the docking results using the Discovey Studio Visualizer software. The analysis of the docking results showed that the compounds brassinolide and strictosidine had the lowest free binding energy values compared to other compounds at each receptor. At the 5R7Y receptor, the best compound was brassinolide with a free bond energy value of -91.68. And at the 7JKV, 7TLL, and 7VH8 receptors, the best compound was strictosidine with a free binding energy value of -111.10 at the 7JKV receptor, -100.23 at the 7TLL receptor, and -101.33 at the 7VH8 receptors. So it can be predicted that strictosidine and brassinolide compounds have stable and strong interactions and have a better effect so that they can be used as candidates for Covid-19 treatment.*

**Keyword:** Tapak Dara (*Cathranthus roseus*), Molecular Docking, Covid-19, Antiviral, receptors Mpro