

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA METABOLIT SEKUNDER
TANAMAN ABUTA (*Cissampelos pareira* Linn)
YANG BERPOTENSI SEBAGAI ANTI COVID-19**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana farmasi
di Universitas Bakti Tunas Husada



FASYA AMMATUL HAWA

31118094

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

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa Metabolit Sekunder Tanaman Abuta (*Cissampelos pareira* Linn) Yang Berpotensi Sebagai Anti COVID-19

Fasya Ammatul Hawa

Progam Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Sejak ditetapkannya COVID-19 menjadi pandemi, banyak riset yang dilakukan untuk mengetahui senyawa dalam tumbuhan yang berpotensi untuk pengobatan dan pencegahan COVID-19. Tumbuhan abuta (*Cissampelos pareira* Linn) telah lama digunakan dalam pengobatan ayurveda oleh masyarakat India untuk mengatasi berbagai masalah kesehatan. Senyawa metabolit sekunder abuta (*Cissampelos pareira* Linn) diketahui memiliki aktivitas antivirus. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa metabolit sekunder yang terdapat pada tumbuhan abuta (*Cissampelos pareira* Linn) sebagai anti COVID-19 secara *in silico*. Hasil menunjukkan bahwa senyawa yang memiliki skor *docking* yang baik pada reseptor 5R7Y, 7JKV, 7TLL, dan 7VH8; memenuhi aturan *Lipinski's rule of five*, dan memiliki nilai absorpsi, distribusi, dan ekskresi yang baik serta tidak menyebabkan hepatotoksik adalah Cissampeline. Interaksi antara senyawa Cissampeline dengan keempat reseptor tersebut juga stabil pada waktu simulasi dinamika molekul selama 10 *nanosecond*. Sehingga senyawa Cissampeline dapat dikatakan berpotensi sebagai anti COVID-19.

Kata Kunci : Abuta (*Cissampelos pareira* Linn); COVID-19; *Molecular Docking*; *Molecular Dynamics*; Studi *In Silico*.

Abstract

Since COVID-19 has been announced as a pandemic, a lot of research has been carried out to find out compounds in plants that have the potential uses for the treatment and prevention of COVID-19. Abuta (*Cissampelos pareira* Linn) has long been used in Ayurvedic by the people of India to treat various health problems. The secondary metabolite of abuta (*Cissampelos pareira* Linn) is known have antiviral activity. This study aims to determine the potential of secondary metabolites of abuta (*Cissampelos pareira* Linn) as anti-COVID-19 by *in silico* studies. The results shows a compound that has good docking values at 5R7Y, 7JKV, 7TLL, and 7VH8 receptors; meets *Lipinski's rule of five*, and has good absorption, distribution, and excretion values and not hepatotoxic is Cissampline. The interaction between the compound and the four receptors was also stable at the time of molecular dynamics simulation for 10 nanoseconds. Thus, Cissampeline can be said have potential as an anti-COVID-19.

Keywords: Abuta (*Cissampelos pareira* Linn); COVID-19; *In Silico* Studies; *Molecular Docking*; *Molecular Dynamics*.