

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG
DALAM TANAMAN JARAK PAGAR (*Jatropha curcas* L.)
BERPOTENSI SEBAGAI ANTI SARS-COV-2**

SKRIPSI

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



**WIDIA DANISA NURUL HUDA
31118167**

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

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa yang Terkandung Dalam Tanaman Jarak Pagar (*Jatropha Curcas* L.) Berpotensi Sebagai Anti SARS-CoV-2

Widia Danisa Nurul Huda

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

COVID-19 merupakan penyakit diakibatkan dari *Coronavirus* jenis baru *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus-2* (SARS-CoV-2) dimana termasuk wabah penyakit yang dimulai pada akhir Desember 2019 ditandai dengan kasus pneumonia misterius yang belum diketahui etiologinya, dimulai di Wuhan, China yang sampai saat ini masih menjadi perhatian dan belum mengalami penghentian kasus. Jarak pagar (*Jatropha curcas* L.) memiliki beberapa senyawa metabolit sekunder yang memiliki aktivitas sebagai antivirus yang dapat menjadi terapi potensial antivirus SARS-CoV-2. Tujuan penelitian ini ialah untuk mengetahui senyawa yang terkandung dalam tanaman jarak pagar dan interaksi yang terjadi dalam menghambat SARS-CoV-2 dengan metode *molecular docking* dan *molecular dynamic*. Hasil menunjukkan senyawa rhoifolin dan stellarin-2 memiliki sifat fisikokimia dengan bobot molekul besar dan farmakokinetik maupun toksisitas yang baik. Hasil *molecular docking* didapatkan skor *docking* rendah rhoifolin sebesar -94,8779 terhadap reseptor 5R7Y kemudian stellarin-2 sebesar -108,2190 terhadap reseptor 7TLL dan memiliki stabilitas baik dalam *molecular dynamic* dibandingkan *native ligan* dan Molnupiravir sebagai pembanding. Interaksi yang terbentuk sebanyak 6 ikatan hidrogen pada rhoifolin dan 7 ikatan hidrogen pada stellarin-2. Hal ini menunjukkan bahwa rhoifolin dan stellarin-2 memiliki potensi dalam kandidat Anti SARS-CoV-2.

Kata kunci : Jarak Pagar, *Molecular Docking*, *Molecular Dynamic*, Rhoifolin, SARS-CoV-2, Stellarin-2

Abstract

COVID-19 is a disease caused by *Coronavirus* a new type *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus-2* (SARS-CoV-2) which includes a disease outbreak that began at the end of December 2019 marked by a mysterious pneumonia case of unknown etiology, starting in Wuhan, China which until now it is still a concern and has not experienced a termination of the case. (*Jatropha curcas* L.) has several secondary metabolites that have antiviral activity which can be a potential antiviral therapy for SARS-CoV-2. The purpose of this study was to determine the compounds contained in the *Jatropha* plant and the interactions that occur in inhibiting SARS-CoV-2 by *molecular docking* and *molecular dynamic*. The results showed that the compounds rhoifolin and stellarin-2 had physicochemical properties with large molecular weights and good pharmacokinetics and toxicity. Results docking score docking was -94.8779 against the 5R7Y receptor and then -108.2190 for stellarin-2 to the 7TLL receptor and had good stability in *molecular dynamics* compared to *native ligands* and Molnupiravir for comparison. The interactions formed were 6 hydrogen bonds in rhoifolin and 7 hydrogen bonds in stellarin-2. This shows that rhoifolin and stellarin-2 have potential as anti-SARS-CoV-2 candidates.

Keywords : *Jatropha*; *Molecular Docking*; *Molecular Dynamic*; Rhoifolin; SARS-CoV-2; Stellarin-2