

**STUDI IN *SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN KELOR (*Moringae oleifera* F) YANG BERPOTENSI
SEBAGAI ANTI SARS-CoV-2**

SKRIPSI



RAHMAT JULIAN

31118130

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

STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN KELOR (*Moringae oleifera* F) YANG BERPOTENSI SEBAGAI ANTI SARS-CoV-2

Rahmat Julian

Jurusan Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada, Jalan Cilolohan No. 36 Tasikmalaya, 46184, Jawa Barat, Indonesia

ABSTRAK

SARS-CoV-2 adalah virus RNA untai positif yang berdiameter mulai dari 60 nm sampai 140 nm yang dapat menginfeksi semua orang. Daun kelor merupakan tanaman yang memiliki aktivitas sebagai pengobatan. Tujuan dari penelitian untuk mengetahui aktivitas senyawa antivirus serta mengetahui senyawa metabolit daun kelor manakah yang lebih baik dan stabil pada reseptor Sars-CoV-2 main protease sebagai agen anti virus. Metode yang digunakan ialah, studi komputasi dengan molekular docking, Uji pkCSM dan simulasi molekular dinamik serta prediksi sintesis dari senyawa. Hasil studi komputasi molekular docking dari 29 senyawa daun kelor didapatkan tiga senyawa terbaik dari hasil docking pada reseptor Main protease senyawa 4-O-alpha-L-Rhamnopyranosylglucosinalbin terbaik pada reseptor 5R7Y, 7JKV, 7VH8, senyawa 4-(4-asetilrhamnosida) pada reseptor 7TLL dengan nilai energi bebas yang rendah. Dari pengujian pkCSM dari 29 senyawa terdapat 3 senyawa yang dipilih memiliki adsorpsi dan distribusi yang baik dan prediksi toksisitas menunjukkan bahwa ada satu senyawa yang tidak memiliki hepatoksisitas. Hasil molekular dinamik pada senyawa 4-O-alpha-L-Rhamnopyranosylglucosinalbin dan senyawa 4-(4-asetilrhamnosida) selama 10 ns menunjukkan nilai RMSD dan RMSF yang rendah dan stabil dibandingkan senyawa pada reseptor reseptor main protease Sars-CoV-2. Dari hasil uji prediksi sintesis senyawa daun kelor, senyawa 4-O-alpha-L-Rhamnopyranosylglucosinalbin dan senyawa 4-(4-asetilrhamnosida) dapat di sintesis dengan melihat alur pembuatan dari kemiripan senyawa. diketahui bahwa senyawa yang terkandung dalam daun kelor dapat dijadikan kandidat berpotensi dengan afinitas dan kestabilan yang lebih baik.

Kata kunci: Covid19, Studi komputasi, Daun Kelor, Main Protease

ABSTRACT

SARS-CoV-2 is a positive-stranded RNA virus ranging in diameter from 60 nm to 140 nm that can infect anyone. Moringa leaf is a plant that has activity as a treatment. The purpose of the study was to determine the activity of antiviral compounds and to find out which metabolite compounds of Moringa leaf were better and more stable at the Sars-CoV-2 main protease receptor as an anti-virus agent. The methods used are computational studies with molecular docking, pkCSM test and molecular dynamic simulations as well as prediction of the synthesis of compounds. The results of the computational molecular docking study of 29 Moringa leaf compounds showed that the three best compounds were docked at the Main protease receptor, 4-O-alpha-L-Rhamnopyranosylglucosinalbin, the best compound at the 5R7Y, 7JKV, 7VH8 receptors, and the 4-(4-acetylramnoside) compound at the 5R7Y, 7JKV, 7VH8 receptors. 7TLL with low free energy value. From the pkCSM test of 29 compounds, 3 selected compounds had good adsorption and distribution and the toxicity prediction showed that there was one compound that did not have hepatotoxicity. The dynamic molecular results on the compound 4-O-alpha-L-Rhamnopyranosylglucosinalbin and compound 4-(4-acetylramnoside) for 10 ns showed low and stable RMSD and RMSF values compared to compounds at the main protease receptor Sars-CoV-2. From the results of the prediction test for the synthesis of Moringa leaf compounds, the compound 4-O-alpha-L-Rhamnopyranosylglucosinalbin and the compound 4-(4-acetylramnoside) can be synthesized by looking at the manufacturing flow from the similarity of the compounds. It is known that the compounds contained in Moringa leaves can be used as potential candidates. with better affinity and stability.

Keywords: Covid19, Computational Studies, Moringa Leaf, Main Protease

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :

Nama : Rahmat Julian

NIM : 31118130

Program Studi : S-1 Farmasi

Fakultas : Farmasi

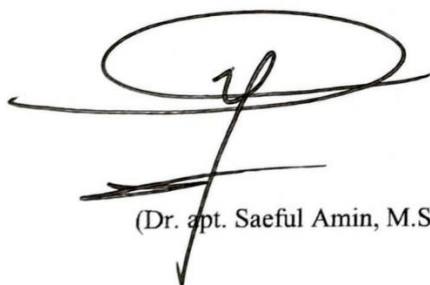
Judul : Studi *In Silico* Senyawa Yang Terkandung Dalam Daun Kelor (*Moringae oleifera* F) Yang Berpotensi Sebagai Anti SARS-CoV-2

Telah disahkan oleh Pembimbing dan diajukan pada Sidang Skripsi

Ditetapkan di : Tasikmalaya

Tanggal : 29 Juli 2022

Pembimbing I



(Dr. apt. Saeful Amin, M.Si)

Pembimbing II



(Dr. Ruswanto, M.Si)