

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM  
TANAMAN ARTEMISIN (*Artemisia annua L.*) SEBAGAI ANTI  
SARS-COV-2**

**SKRIPSI**



**ANDYNY DWINOVIA RIANTY  
31118132**

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

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM  
TANAMAN ARTEMISIN (*Artemisia annua L.*) SEBAGAI ANTI  
SARS-COV-2**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana farmasi**



**ANDYNY DWINOVIA RIANTY**

**31118132**

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

## ABSTRAK

### ***STUDI IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM TANAMAN ARTEMISIN (*Artemisia annua L.*) SEBAGAI ANTI SARS -COV2**

**Andyny Dwinovia Rianty**

Prodi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

SARS-CoV-2 adalah anggota virus dengan genus Betacoronavirus, pada virus ini sebelumnya dikenal sebagai sindrom atau biasa disebut dengan MERS (Middle East Respiratory Syndrome). Secara genetik SARS- CoV-2 yang ditemui pada saat ini mempunyai kemiripan secara genetik dengan SARS yang ditemui pada tahun 2002. Coronavirus akan menjadi infeksiif jika mencapai tempat yang sediakan pada area seluler pertumbuhan virus serta mutasi virus. Tanaman Artemisin (*Artemisia annua L.*) sudah digunakan selaku racikan etnomedisinal yang berarti sepanjang 2 milenium. Artemisin (*Artemisia annua L.*) berkhasiat sebagai antipiretik, antiseptik, antibakteri, antispasmodik, karminatif, stimulan, dan tonik. Dan Artemisin (*Artemisia annua L.*) juga adalah herbal yang memiliki khasiat sebagai antivirus dan menunjukkan efek penghambatan pada strain virus Corona. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui efektivitas dan ikatan yang terjadi pada senyawa yang terkandung dari tanaman Artemisin (*Artemisia annua L.*) dengan penambatan molekular antara ligan antivirus dengan reseptor Main protease (Mpro) dengan mengetahui nilai *binding affinity*, ikatan hydrogen, ikatan hidrofobik, farmakokinetik serta molekular dinamik. Untuk reseptor yang digunakan antara lain 5R7Y, 7JKV, 7TLL, dan 7VH8. Sedangkan obat pembandingnya yaitu Remdesivir, Molnupiravir, Nirmatrelvir, dan Favipiravir. Dari 20 senyawa diambil senyawa terbaik dari setiap reseptor, senyawa yang memiliki nilai *binding affinity* lebih rendah yaitu 1,3-O-Dicaeffoylquinic, Methyl-3,4-di-O-caffeoylquinic acid dan Dauceterol. Maka dapat diprediksi bahwa ketiga senyawa tersebut mempunyai ikatan yang stabil dan efektivitas yang lebih baik sehingga dapat dijadikan sebagai kandidat pengobatan Covid-19.

**Kata Kunci :** Sars-CoV-2, Antivirus, Tanaman Artemisin (*Artemisia annua L.*), Main Protease (*Mpro*), Molecular docking

## **ABSTRACT**

### **IN SILICO STUDY OF COMPOUNDS CONTAINED IN ARTEMISIN PLANT (*Artemisia annua* L.) AS ANTI SARS-COV2**

**Andyny Dwinovia Rianty**

*Program of S-1 Pharmacy Study, Bakti Tunas Husada Tasikmalaya University*

*SARS-CoV-2 is a member of a virus with the genus Betacoronavirus, this virus was previously known as a syndrome or commonly referred to as MERS (Middle East Respiratory Syndrome). Genetically, the SARS-CoV-2 found today is genetically similar to the SARS discovered in 2002. The coronavirus will become infective if it reaches the site provided for in the cellular area for viral growth and virus mutation. Artemisin plants (*Artemisia annua* L.) It has been used as an ethnomedicinal compound meaning for 2 millennia. Artemisin (*Artemisia annua* L.) is efficacious as an antipyretic, antiseptic, antibacterial, antispasmodic, carminative, stimulant, and tonic. And Artemisin (*Artemisia annua* L.) is also an herb that has antiviral properties and shows an inhibitory effect on strains of the Corona virus. The purpose of this study was to determine the effectiveness and bonding that occurs in compounds contained from the Artemisin plant (*Artemisia annua* L.) with molecular binding between antiviral ligands and the Main protease receptor (Mpro) by knowing the value of binding affinity, hydrogen bonding, hydrophobic bonding, pharmacokinetics. and molecular dynamics. The receptors used include 5R7Y, 7JKV, 7TLL, and 7VH8. While the comparison drugs are Remdesivir, Molnupiravir, Nirmatrelvir, and Favipiravir. Of the 20 compounds, the best compounds were taken from each receptor, the compounds that had a lower binding affinity value were 1,3-O-Dicaeffoylquinic, Methyl-3,4-di-O-caffeoylquinic acid (and Dauceterol. So it can be predicted that the three compounds has a stable bond and better effectiveness so that it can be used as a candidate for Covid-19 treatment.*

**Keywords:** *Sars-cov-2, Antivirus, Artemsin Plant (*Artemisia annua* L.), Main Protease (Mpro), Molecular docking*