

**STUDI *IN SILICO* KOMPONEN SENYAWA YANG
TERKANDUNG DALAM BAWANG PUTIH (*Allium sativum L.*)
SEBAGAI ANTI SARS-CoV-2**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana farmasi

HENDRIK HERMAWAN

31118139



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

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* KOMPONEN SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM BAWANG PUTIH (*Allium sativum L.*) SEBAGAI ANTI SARS-CoV-2

Hendrik Hermawan

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Penyakit *corona virus disease 2019* (COVID-19) yaitu penyakit yang bisa menular dari satu manusia ke manusia lainnya, penyebab penularan disebabkan oleh sindrome pernafasan akut corona virus 2 (SARS-CoV-2). Pengujian aktivitas antivirus dari senyawa yang terkandung dalam tanaman bawang putih (*Allium sativum L.*) sebagai kandidat anti SARS-CoV-2. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui aktivitas antivirus dari senyawa yang terkandung dalam tanaman bawang putih (*Allium sativum L.*) sebagai anti SARS-CoV-2 serta untuk mengetahui ikatan yang terjadi antara senyawa yang terkandung dalam tanaman bawang putih (*Allium sativum L.*) dengan reseptor SARS-CoV-2. Virtual skrining dilakukan dengan melakukan *docking* dengan menggunakan program PLANTS, lalu dilakukan penambatan dinamika molekular dengan menggunakan *AmberTools*. Hasil *molecular docking* dari 22 senyawa yang diujikan yang terkandung dalam tanaman bawang putih yang diujikan terhadap reseptor target 5R7Y, 7JKV, 7TLL, 7VH8. Dari 22 senyawa yang diuji didapatkan 3 senyawa terbaik yang memiliki nilai binding affinity yang paling baik diantara senyawa lainnya yaitu Allithiamine, Epicatechin, Apigenin. Hasil penelitian menunjukkan bahwa ketiga senyawa tersebut lebih stabil dan lebih baik dari native ligand reseptor 5R7Y, tetapi tidak lebih baik dari native ligand reseptor 7JKV, 7TLL, Dan 7VH8.

Kata Kunci : Bawang putih, SARS-CoV-2, Molekular Docking.

Abstract

Corona virus disease 2019 (COVID-19) is a disease that can be transmitted from one human to another, the cause of transmission is caused by the acute respiratory syndrome corona virus 2 (SARS-CoV-2). Testing the antiviral activity of compounds contained in the garlic plant (Allium sativum L.) as anti-SARS-CoV-2 candidates. CoV-2 and to determine the bond that occurs between the compounds contained in the garlic plant (Allium sativum L.) and the SARS-CoV-2 receptor. Virtual screening is done by docking using the PLANTS program, then molecular dynamics docking is done using AmberTools. Molecular docking results of 22 tested compounds contained in garlic were tested against target receptors 5R7Y, 7JKV, 7TLL, 7VH8. Of the 22 compounds tested, 3 of the best compounds had the best binding affinity values among other compounds, namely Allithiamine, Epicatechin, Apigenin. The results showed that the three compounds were more stable and better than the native ligand receptor 5R7Y, but not better than the native ligand receptor 7JKV, 7TLL, and 7VH8.

Keywords: Garlic, SARS-CoV-2, Molecular Docking