

INTISARI

Vedha G. B., 2020 SKRINING KANDUNGAN SENYAWA TANAMAN SAMBILOTO DAN JAHE TERHADAP PROTEIN TARGET TERAPI COVID-19 DENGAN METODE ANALISIS DOCKING MOLEKULER. PROPOSAL, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Virus corona yang mewabah pada 2020 dikenal sebagai covid-19 bukanlah merupakan virus baru, melainkan masih 1 *family* dengan virus SARS. Protein target terapi dari covid-19 berhasil diidentifikasi sebagai target terapi seperti Plpro dan 3Clpro. Penggunaan herbal merupakan alternatif untuk pengobatan seperti kandungan senyawa dari jahe dan sambiloto mampu sebagai antivirus. Penelitian ini bertujuan mencari potensi senyawa jahe dan sambiloto untuk berinteraksi dengan protein target terapi dari corona yaitu serta mengevaluasi parameter farmakokinetik senyawa terpilih.

Menggunakan metode *docking* molekuler dengan *software* autodock dengan ligan uji 17 senyawa jahe dan 16 senyawa sambiloto. Hasil dipilih dengan mempertimbangkan *lowest binding energy* dan *num in clus*. Senyawa terpilih dilanjutkan dengan melihat interaksi ligan-protein menggunakan Discovery dan selanjutnya senyawa dilakukan prediksi farmakokinetik dengan ADMETLab.

Hasil dari proses *docking* didapati senyawa dari jahe dan sambiloto memiliki interaksi dengan protein target 3Clpro yang serupa dengan ligan asli, sementara pada Plpro interaksi serupa dengan ligan asli terbaik pada senyawa dari sambiloto, untuk hasil prediksi farmakokinetik dari senyawa terpilih mendapati hasil beragam namun senyawa terbaik yang dipilih adalah 6-gingerol dan andrographolide. Prediksi ini perlu diuji secara langsung untuk melihat potensi sesungguhnya.

Kata kunci : Covid-19, jahe, sambiloto, *docking*

The corona virus that became pandemic in 2020 known as covid-19 is not a new virus, but is still one family with the SARS virus. Therapeutic target proteins from covid-19 have been identified as therapeutic targets such as Plpro and 3Clpro. The use of herbs is an alternative for treatment such as the compound content of ginger and sambiloto as an antiviral. This study aims to find the potential for ginger and sambiloto compounds to interact with therapeutic target proteins from corona, and evaluate the pharmacokinetic parameters of selected compounds.

Using the molecular docking method with autodock software with the 17 test ligand from ginger compounds and 16 sambiloto compounds. Results are selected by evaluating the lowest binding energy and num in clus. The selected compound was continued by observing the ligand-protein interaction using Discovery and then the compound was predicted the pharmacokinetic with ADMETLab.

The results of the docking process found that compounds from ginger and sambiloto had interactions with the 3Clpro target protein which similar to the original ligands, while in Plpro the similar interactions to the best native ligands is compounds from sambiloto, for pharmacokinetic prediction results from selected compounds found mixed results but the best compounds were selected were 6-gingerol and andrographolide. This prediction needs to be tested directly to see its true potential.

Keyword : Covid-19, ginger, sambiloto, docking