

**SKRINING KANDUNGAN SENYAWA TANAMAN SAMBILOTO DAN
JAHE TERHADAP PROTEIN TARGET TERAPI COVID-19 DENGAN
METODE ANALISIS *DOCKING* MOLEKULER**



Oleh:

Gandhi Barajana Vedha

23175098A

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA**

2020

**SKRINING KANDUNGAN SENYAWA TANAMAN SAMBILOTO DAN
JAHE TERHADAP PROTEIN TARGET TERAPI COVID-19 DENGAN
METODE ANALISIS DOCKING MOLEKULER**

SKRIPSI

*Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
derajat Sarjana Farmasi
Program Studi Ilmu Farmasi pada Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi*

Oleh:

Gandhi Barajana Vedha

23175098A

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
2020**

PENGESAHAN SKRIPSI

berjudul

SKRINING KANDUNGAN SENYAWA TANAMAN SAMBILOTO DAN JAHE TERHADAP PROTEIN TARGET TERAPI COVID-19 DENGAN METODE ANALISIS *DOCKING* MOLEKULER

Oleh :

Gandhi Barajana Vedha

23175098A

Dipertahankan di hadapan Panitia Penguji Skripsi
Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi
Pada Tanggal : 20 November 2020

Mengetahui,
Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi



Dekan,

Prof. Dr. apt. RA Oetari, S.U., M.M., M.Sc.

Pembimbing Utama

Dr. apt. Rina Herowati, M.Si.

Pembimbing Pendamping

Desi Purwaningsih, M.Si.

Penguji :

1. apt. Dwi Ningsih, M.Si.
2. apt. Ismi Puspitasari, M.Farm.
3. apt. Ghani Nurfiana, M.Farm.
4. Dr. apt. Rina Herowati, M.Si.

PERSEMBAHAN

Untuk Orang Tuaku, terutama Mamah yang selalu kerja keras demi masa depanku

&

Untuk Dosen dan Mentor yang tidak pernah lelah untuk berbagi ilmu

Driven by Passion

Godbless and Gaspoll

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini adalah hasil pekerjaan saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka

Apabila skripsi ini merupakan jiplakan dari penelitian/karya ilmiah/skripsi orang lain, maka saya siap menerima sanksi, baik secara akademis maupun hukum

Surakarta,

Tanda tangan



Gandhi Barajana Vedha

KATA PENGANTAR

Puji Syukur penulis panjatkan ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan rahmat dan kasih sayang-Nya selama hidup ini sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini guna memenuhi persyaratan untuk mencapai derajat Sarjana Farmasi (S. Farm) dari Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi, Surakarta.

Skripsi yang mengusung judul “SKRINING KANDUNGAN SENYAWA TANAMAN SAMBILOTO DAN JAHE TERHADAP PROTEIN TARGET TERAPI COVID-19 DENGAN METODE ANALISIS *DOCKING* MOLEKULER” dengan harapan hasil penelitian ini mampu menjadi referensi untuk kandidat bahan alam dalam mengobati penyakit covid-19.

Skripsi ini tidak mungkin dapat dikerjakan sendiri melainkan adanya dukungan dan bantuan dari beberapa pihak, baik material maupun spiritual. Oleh karena itu, pada kesempatan ini dengan segala kerendahan hati penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada :

1. Prof. Dr. apt. R.A. Oetari, S.U., M.M., M.Sc. Selaku Dekan Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi, Surakarta
2. Dr. apt. Wiwin Herdwiani, M.Sc. selaku Kepala Program Studi S1 Farmasi Universitas Setia Budi, Surakarta.
3. apt. Taufik Turahman, M. Farm. selaku pembimbing akademik atas segala bimbingan dan pengarahannya.
4. Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. selaku pembimbing utama yang telah bersedia memberikan banyak sekali dukungan baik dukungan waktu untuk revisi maupun konsultasi, fasilitas untuk belajar tentang *docking*, mendampingi, membimbing, memberi semangat serta saran-saran yang membangun sehingga membantu terselesaikannya skripsi ini.
5. Desi Purwaningsih, M,Si. Selaku pembimbing pendamping yang telah membimbing, memberikan waktunya untuk melakukan revisi, banyak masukan

yang sangat membangun, dan memberikan semangat yang tidak pernah lelah sehingga membantu terselesaikan skripsi ini.

6. apt. Pratama Anggi Saputra, S.Farm. selaku mentor yang sabar dalam menjawab pertanyaan saya yang selalu aneh dan sewaktu waktu serta membagi ilmu pengetahuannya tentang penelitian dengan metode *docking*.
7. Prof. Dr. Muchalal atas makan siang sate kambing sewaktu semester 1 yang menjadi memori dan berhasil mengubah pola berpikir saya, serta atas semua nasehat ketika kuliah
8. Kedua orang tuaku atas doa, kasih sayang, semangat dan segala dukungannya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini walaupun terkadang ingin untuk mengajak pergi untuk menghilangkan penat.
9. Untuk pasukan laki-laki dari teori 1 yang selalu menghadirkan tawa dikala pusing kuliah maupun tugas
10. Teman-teman Teori 1 yang selalu kompak dan selalu mengibur ketika kelas
11. Seluruh teman – teman seperjuangan S1 Farmasi angkatan 2017
12. Teman-teman SMA terutama Gamaliel selaku teman yang selalu melakukan invasi kamar dan memberikan motivasi tujuan dari hobi otomotif
13. Satu satunya motorku GSX hitam yang selalu menghantarkan kuliah, maupun ketika diskusi, untung selama kuliah belum pernah mogok sehingga tidak pernah ketinggalan kelas
14. Pihak yang tidak dapat disebutkan dalam membantu mengerjakan skripsi ini.

Kiranya Tuhan Yang Maha Esa selalu memberkati kalian selalu.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih sangat jauh dari kesempurnaan. Maka, penulis mengharapkan adanya kritik serta saran untuk penyempurnaan penulisan skripsi ini. Akhir kata, penulis berharap semoga apa yang telah penulis persembahkan dalam karya ini akan bermanfaat bagi pihak yang berkepentingan.

Surakarta,

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
SAMPUL DEPAN	i
HALAMAN JUDUL.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
HALAMAN PERNYATAAN	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xv
ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN	xvi
INTISARI.....	xvii
ABSTRAK	xviii
BAB I. PENDAHULUAN	1
A. Latar belakang.....	1
B. Rumusan	4
C. Tujuan	4
D. Manfaat	5
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA.....	6
A. <i>Coronavirus</i>	6
1. Pengertian <i>coronavirus</i> dan gejala.....	6
2. Reseptor <i>coronavirus</i>	8

B. Sambiloto	11
1. Klasifikasi	11
2. Morfologi	11
3. Kegunaan dan kandungan.....	12
C. Jahe	14
1. Klasifikasi	14
2. Morfologi	15
3. Kegunaan dan kandungan.....	15
D. Penelitian docking sebelumnya.....	17
E. Docking Molekuler	19
1. Autodock.....	19
2. Vega ZZ	19
3. MarvinSketch.....	20
4. <i>Webtool</i> Prediksi ADME	20
5. Software visualisasi	21
6. Blind Docking.....	21
F. Landasan Teori.....	22
G. Hipotesis	23
 BAB III. METODE PENELITIAN.....	 24
A. Populasi Dan Sampel	24
B. Variabel Penelitian.....	24
1. Identifikasi variabel utama.....	24
2. Klasifikasi variabel utama	24
3. Definisi operasional variabel utama	25
C. Alat dan Bahan.....	25
1. Alat.....	25
1.1.Perangkat keras	25
1.2.Perangkat lunak.....	25
2. Bahan	25
D. Cara Kerja	26
1. Pemilihan target molekuler.....	26
2. Pembuatan senyawa.....	26
3. Cara kerja docking molekuler.....	26
3.1. Preparasi target makromolekul	26
3.2. Preparasi ligan asli	27
3.3. Validasi ligan pada protein target	27
3.4. Preparasi senyawa uji	27
3.5. Proses pembuatan grid.....	27
3.6. Proses docking molekuler	27
3.7. Metode blind docking	28
3.8. Analisa ikatan yang terbentuk	28
E. Analisis Hasil Docking Molekuler	28
1. Energi ikatan.....	28

2. Data interaksi	28
3. Prediksi ADME	29
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	30
A. Preparasi Proses <i>Docking</i>	30
1. Preparasi Ligan Uji	30
2. Pemilihan Protein Target	31
3. Validasi <i>Docking</i> Protein Target	32
B. Docking Ligan Uji	40
1. Protein Target 3Clpro	40
1.1. 6-Gingerol	41
1.2. 5-Acetoxy 6-gingerdiol.	42
1.3. Methyl-5-acetoxy-6-gingerdiol.....	43
1.4. 6-Shogaol.	44
1.5. 1-Dehydro-8-gingerdione	45
1.6. Andrographolide.	46
1.7. Neoandrographolide.	47
1.8. 5,7,2',3'-Tetramethoxyflavanone.	48
1.9. 5-Hydroxy-7,2',6'-Trimethoxyflavone.....	49
1.10. Bisandrographolide C.	50
2. Protein Target Plpro.....	52
2.1. 5-Acetoxy1,7-bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl) heptan-3-one	52
2.2. 6-Gingerdiol.....	53
2.3. 6-Gingerol.....	54
2.4. 1-Dehydro-6-gingerdione	55
2.5. 1-Dehydro-8-gingerdione	56
2.6. Deoxyandrographolide	57
2.7. Andrographolide	58
2.8. 5,7,2',3'-Tetramethoxyflavanone	59
2.9. 5,8,2'-Trihydroxy-7-Methoxyflavone	60
2.10. Skullcapflavone I	61
C. Prediksi Farmakokinetik	62
1. Parameter Fisikokimia	63
2. Absorpsi	64
3. Distribusi.....	66
4. Metabolisme	67
5. Eksresi.....	69
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN.....	72
A. Kesimpulan	72
B. Saran	73
Daftar Pustaka	74

Lampiran	
----------------	--

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1 Lingkup kesamaan genetik <i>coronavirus</i>	7
Gambar 2 Interaksi antara RBD covid-19 dengan ACE2	9
Gambar 3. interaksi ligan-makromolekul dengan protein sebelum validasi (kiri) dan sesudah (kanan) menggunakan Discovery Studio.....	34
Gambar 4. interaksi ligan-makromolekul menggunakan poseview protein plus dengan protein sebelum validasi (kiri) dan sesudah (kanan)	35
Gambar 5. interaksi ligan dengan protein menggunakan Discovery Studio	36
Gambar 6. interaksi ligan dengan protein menggunakan poseview proteinplus.....	36
Gambar 7. Hasil visualisasi blind docking dengan Discovery Studio	38
Gambar 8. Perbandingan urutan asam amino 6M0J DockThor dengan 6M0J pdb.....	38
Gambar 9. perbedaan interaksi asam amino autodock4(kiri) dengan autodock vina(kanan).....	39
Gambar 10. Perbandingan interaksi 6 Gingerol dan ligan Asli dengan Discovery	42
Gambar 11. Perbandingan interaksi 5-Acetoxy 6-gingerdiol dengan ligan asli	43
Gambar 12. Perbandingan interaksi Methyl 5-Acetoxy 6-gingerdiol dengan Ligan asli.....	44
Gambar 13. Perbandingan interaksi 6-Shogaol dengan Ligan asli	45
Gambar 14. Perbandingan interaksi 1-Dehydro-8-gingerdione dengan ligan asli	46
Gambar 15. Perbandingan interaksi Andrographolide dengan ligan asli.....	47
Gambar 16. Perbandingan interaksi Neoandrographolide dengan ligan asli ...	48
Gambar 17. Perbandingan interaksi 5,7,2',3'-Tetramethoxyflavone dengan ligan asli	49
Gambar 18. Hasil interaksi 5Hydroxy-7,2',6-Trimethoxyflavone dengan Discovery	50

Gambar 19. Perbandingan interaksi Bisandrographolide C dengan ligan asli.	51
Gambar 20. Perbandingan interaksi 5-Acetoxy1,7-bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)heptan-3-one dengan ligan asli	53
Gambar 21. Perbandingan interaksi 6-Gingerdiol dengan ligan asli	54
Gambar 22. Perbandingan interaksi 6-Gingerol dengan ligan asli	55
Gambar 23. Perbandingan interaksi 1-Dehydro-6-Gingerdione dengan ligan asli	56
Gambar 24. Perbandingan interaksi 1-Dehydro-8-Gingerdione dengan ligan asli	57
Gambar 25. Perbandingan interaksi Deoxyandrographolide dengan ligan asli	58
Gambar 26. Perbandingan interaksi Andrographolide dengan ligan asli.....	59
Gambar 27. Perbandingan interaksi 5,7,2',3'-Tetramethoxyflavanone dengan ligan asli	60
Gambar 28. Perbandingan interaksi 5,8,2'-Trihydroxy-7-Methoxyflavone dengan ligan asli.....	61
Gambar 29. Perbandingan interaksi Skullcapflavone I dengan ligan asli.....	62

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Nama protein target.....	10
Tabel 2. Kandungan kimia dalam tanaman sambiloto	12
Tabel 3. Kandungan senyawa kimia dalam jahe	15
Tabel 4. Asam amino pada protein PLpro	36
Tabel 5. Hasil prediksi Fisikokimia	63
Tabel 6. Hasil prediksi Absorpsi.....	65
Tabel 7. Hasil prediksi Distribusi.....	66
Tabel 8. Hasil prediksi Metabolisme	68
Tabel 9. Hasil prediksi Substrat Metabolisme	69
Tabel 10. Hasil prediksi $T_{1/2}$	70

DAFTAR LAMPIRAN

1. Menggambar 2 Dimensi Struktur.....	79
2. Konversi Struktur menjadi pdb	80
3. Preparasi Ligan uji	81
4. Mengetahui dan Memisahkan Ligan Asli	82
5. Preparasi ligan asli	83
6. Preparasi protein.....	84
7. Preparasi grid validasi	85
8. Validasi docking.....	88
9. Pemilihan energi ikatan terbaik.....	90
10. Visualisasi	91
11. Docking dengan ligan uji	92
12. Visualisasi hasil docking.....	93
13. Pembacaan prediksi farmakokinetik	95

ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN

Gly	Glisin
Glu	Asam Glutamat
Pro	Proline
Tyr	Tyrosine
His	Histidine
Asp	Asam Aspartat

INTISARI

Vedha G. B., 2020 SKRINING KANDUNGAN SENYAWA TANAMAN SAMBILOTO DAN JAHE TERHADAP PROTEIN TARGET TERAPI COVID-19 DENGAN METODE ANALISIS *DOCKING* MOLEKULER..

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 menjadi alternatif untuk pengobatan seperti kandungan senyawa dari jahe dan sambiloto mampu sebagai antivirus. Penelitian ini bertujuan mengetahui potensi senyawa jahe dan sambiloto berikatan dengan protein target terapi dari corona serta mengevaluasi parameter farmakokinetik senyawa terpilih.

Penelitian ini menggunakan metode *docking* molekuler dengan *software* autodock dengan ligan uji 17 senyawa jahe dan 16 senyawa sambiloto. Hasil dipilih dengan memeprtimbangkan *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 1-Dehydro-6-gingerdione dan Neoandrographolide. Prediksi ini perlu diuji secara langsung untuk melihat potensi sesungguhnya.

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

ABSTRAK

Vedha G. B., 2020 SCREENING OF SAMBILOTO AND GINGER CHEMICAL CONTENTS AGAINST PROTEIN TARGET FOR COVID-19 THERAPY WITH MOLECULAR DOCKING ANALYSIS METHOD.

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 1-Dehydro-6-gingerdione and Neoandrographolide. This prediction needs to be tested directly to see its true potential.

Keyword : Covid-19, ginger, sambiloto, docking

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Akhir tahun 2019 hingga awal tahun 2020 dunia kesehatan dibuat terkejut, karena di kota Wuhan Provinsi Hubei China muncul beberapa orang yang mengeluh sakit pernapasan dengan kenaikan suhu tubuh. Tidak lama setelah awal tahun baru diumumkan sebagai suatu wabah penyakit baru yang disebut dengan nama 2019-nCoV atau yang lebih dikenal dengan sebutan virus corona. Sampai saat ini sumber dari *corona virus* masih menjadi pertanyaan, ada yang menduga virus ini berasal dari hewan mamalia seperti kelelawar yang ditularkan pada manusia (WHO 2020). Jumlah kasus virus corona atau Covid-19 hingga awal Juli 2020 menjad 11.416.559 kasus dan menyebabkan kematian sebesar 534.268 kasus.

Negara lain juga sudah mengkonfirmasi adanya orang yang terinfeksi virus ini seperti negara : Singapura, Malaysia, dan beberapa negara lain di asia tenggara. Kasus yang terjadi di luar China disebabkan karena adanya riwayat orang tersebut pernah mengunjungi China baru baru ini (WHO 2020). Awal Maret 2020 muncul 2 kasus pertama covid 19 di Indonesia dimana menurut informasi kedua pasien pertama ini mulai terinfeksi pertengahan Febuari namun baru dinyatakan positif pada awal bulan maret. Setelah terungkapnya dua kasus pertama ini akhirnya muncul beberapa orang yang mengeluhkan gejala serupa dengan covid 19 yang tersebar tidak hanya pada Jakarta saja, wilayah lain juga mengkonfirmasi adanya kasus ini hingga pada awal bulan Juli 2020 penyebaran kasus covid-19 lebih meluas, hingga beberapa wilayah ditetapkan sebagai zona merah karena tingginya kasus corona.

Penelitian yang dilakukan oleh Wang (2020) pada pasien yang terjangkit *corona virus* salah satu rumah sakit di Wuhan, China. Hasil dari penelitian ini menunjukkan bahwa usia penderita pada awalnya berkisar antara 42-68 tahun atau usia lansia yang dikarenakan penurunan sistem imun, namun tidak memungkiri

untuk usia muda juga mudah terjangkit, seperti yang terjadi pada kota Surakarta pada bulan April yaitu adanya kasus anak-anak yang terjangkit covid 19. Beberapa tanda gejala yang muncul seperti demam, kelelahan, batuk kering, dan susah bernafas. Sementara itu penelitian oleh Zhu (2020) pada rumah sakit di Wuhan 27 Desember 2019 menunjukkan 3 dari beberapa pasien yang terinfeksi corona virus mengalami demam dengan suhu berkisar antara 37-38°C dan batuk dengan disertai rasa tidak nyaman pada dada, empat hari setelahnya yaitu tanggal 27 Desember 2019 batuk dan rasa tidak nyaman di dada semakin memburuk namun demam sudah mereda dimana pasien tersebut merupakan penjual di pasar Wuhan yang diduga sebagai tempat awal mula infeksi. SARS-CoV dari manusia secara genetik sama dengan *SARS like Coronaviruses* dari kelelawar didapatkan dari barat daya China terbentuk dari subgenus sarbecovirus, dari hasil didapatkan 2019-nCoV dimana virus yang menjadi penyebab pneumonia di Wuhan adalah merupakan novel *betacoronavirus* subgenus Sarbecovirus dari keluarga Coronaviridae (Zhu 2020).

Sementara itu penggunaan obat remdesivir menurut Beigel *et al* (2020) disinyalir lebih baik dibandingkan dengan plasebo dalam mempersingkat waktu untuk pemulihan pada orang dewasa yang dirawat di rumah sakit dengan diagnosa covid-19 dan bukti infeksi saluran pernapasan. Sumber lain ada yang mengatakan bahwa beberapa negara mencoba HIV sebagai obat anti *coronavirus* (cnbcindonesia.com) sama seperti dahulu yang digunakan pada SARS (Yamamoto *et al.* 2004) karena penggunaan obat HIV mampu menghambat replikasi dari virus SARS ini. Pencarian obat yang terbukti poten dan mampu sebagai antivirus dari covid 19 ini sampai sekarang masih gencar dilakukan penelitian dan hingga saat ini telah bermunculan penelitian mengenai pencarian obat untuk covid 19 ini. Karena perkembangan teknologi yang sudah maju beberapa penelitian yang sudah dilakukan berbasis komputasi untuk mencari target protein pada covid 19 ini, diantaranya mencari sisi yang mampu menghambat (inhibitor) dari covid 19 ini.

Menurut Prof. Dr. Chaerul Anwar Nidom, drh., MS mengatakan infeksi corona ditangkal dengan kurkumin yang banyak terkandung dalam temulawak, jahe, kunyit, dan sereh yang dikonsumsi harian oleh masyarakat Indonesia

(cnnindonesia.com). Penelitian yang dilakukan oleh Zahedipour *et al* (2020) mengatakan bahwa tinjauan aktivitas antivirus dari kurkumin bisa menjadi kandidat karena kemampuan kurkumin untuk memodulasi berbagai target molekuler. Kemampuan kurkumin juga dapat menekan edema paru dan jalur terkait fibrosis pada infeksi covid-19, kelebihan ini memiliki masalah terkait bioavailabilitasnya karena penelitian yang dilakukan oleh Yang *et al.* (2007) menunjukkan bahwa kurkumin yang diberikan dengan dosis 10 mg/kg secara IV lebih baik bioavailabilitasnya dibandingkan dengan oral dosis 500 mg/kg. Pemberian dosis kurkumin masih bisa ditingkatkan dengan ketentuan masih dalam batas range dosis tidak beracun (Kunnumakkara *et al.* 2019)

Senyawa kurkumin dapat ditemukan pada tanaman jahe atau kunyit. Pemanfaatan jahe atau kunyit hanya digunakan sebatas obat bahan herbal atau dikonsumsi dalam makanan dan minuman yaitu sebagai penambah cita rasa dan rasa menghangatkan. Mathew dan Hsu (2018) mengatakan bahwa senyawa kurkumin mampu mempunyai aktivitas lain yaitu sebagai antiviral (antivirus). Imanishi *et al.* (2006) membuktikan bahwa jahe yang seringkali dikenal sebagai tanaman tradisional yang mampu melawan perkembangan dari *influenza*.

Disisi lain penelitian yang dilakukan oleh Chen *et al.* (2009) menunjukkan bahwa ada suatu senyawa dan turunannya dari ekstrak daun sambiloto (*Andrographis paniculata*) memiliki efek sebagai antivirus dengan virus yang dihambat adalah influenza, influenza menyebabkan gejala yang timbul pada saluran pernafasan sama seperti covid-19 yang menyerang pada target yang sama yaitu saluran pernapasan.

Bidang penemuan obat *coronavirus* sangat diperlukan, namun pengembangan obat masih terkendala pengujian langsung kepada pasien atau hewan uji untuk menentukan potensi obat tersebut. Salah satu metode untuk membantu mencari senyawa yang poten sebagai obat adalah dengan metode *in silico* yaitu dengan metode *docking* molekuler, metode ini akan memperhitungkan gambaran molekul senyawa berinteraksi dengan protein target dengan memprediksi konformasi dan melakukan ranking dari ikatan energy bebasnya (Forli *et al.* 2016).

Proses penelitian berbasis *docking* molekuler juga mempertimbangkan faktor dari obat tersebut terutama pada faktor ADME dikarenakan obat yang baik adalah obat yang mampu diabsorpsi dengan baik sehingga efeknya mampu timbul. Beberapa penelitian *docking* yang sudah ada selama masa pandemi covid-19 menggunakan senyawa aktif yang menjadi ciri khas dari tanaman tersebut dan menggunakan *software* Autodock Vina dengan sistem berbasis skrining (Murugan dkk 2020).

Penelitian ini bertujuan untuk mencoba melakukan proses docking molekuler dan mengetahui interaksinya menggunakan senyawa yang terkandung dalam tanaman jahe dan sambiloto yang umumnya mudah ditemui di Indonesia dengan protein target sebagai obat dari penyakit yang menjadi pandemic pada tahun 2020, yaitu *coronavirus*.

B. Rumusan

Berdasarkan latar belakang dari kasus *coronavirus* tadi dan dengan tanaman herbal Indonesia maka dapat ditarik rumusan masalahnya yaitu :

Pertama, senyawa apa saja yang terkandung dari sambiloto dan jahe yang diprediksi memiliki interaksi dengan protein target covid-19?

Kedua, bagaimana interaksi senyawa sambiloto dan jahe terhadap protein target terapi covid-19?

Ketiga, bagaimana profil ADME dari senyawa yang diprediksi memiliki interaksi dengan protein target covid-19?

C. Tujuan

Dari rumusan masalah tersebut maka dapat diketahui tujuan dari penelitian ini adalah :

Pertama, mengetahui komponen senyawa yang terkandung dalam jahe dan sambiloto yang berperan berikatan dengan protein target terapi covid-19.

Kedua, mengetahui interaksi senyawa dalam jahe dan sambiloto terhadap protein covid-19 yang hampir serupa dengan ligan asli.

Ketiga, mengetahui profil ADME dari senyawa yang diprediksi memiliki potensi sebagai obat covid-19.

D. Manfaat

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah mampu mengetahui dari tanaman herbal yang sering digunakan oleh kita dan yang mudah ditemui di Indonesia sebagai obat atau agen anti *coronavirus* yang nantinya dapat dikembangkan lebih lanjut sebagai obat jadi yang bisa mengurangi infeksi *coronavirus*, juga dapat mengetahui karakteristik interaksi senyawa dari tanaman herbal ini pada sisi covid-19. Manfaat lain untuk peneliti, penelitian ini dapat menambah wawasan dan keterampilan terkait data dan metode suatu rancangan penemuan obat yaitu dengan metode docking molekuler dan mampu mencari senyawa dari tanaman herbal Indonesia