

INTISARI

ANGGRAENI S. A., 2020, SKRINING TARGET MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA AKAR MANIS (*Glycyrrhiza glabra* L.) TERHADAP TARGET TERAPI VIRUS CORONA METODE *DOCKING* MOLEKULER, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA

Coronavirus disease 2019 (COVID-19) merupakan penyakit yang disebabkan karena virus yang menginfeksi sel-sel pada saluran napas yang melapisi alveoli. Target molekuler yang berhasil diteliti adalah papain like protease (PLpro) dan 3-chymotrypsin like protease (3CLpro). Penelitian sebelumnya melaporkan bahwa akar manis dapat merangsang sekresi IFN- β yang memiliki aktivitas sebagai antivirus. Penelitian ini bertujuan mengetahui kandungan senyawa pada akar manis terhadap target terapi virus corona dan memprediksi profil farmakokinetik dari kandungan senyawa yang terpilih berdasarkan hasil *docking* molekuler.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah *docking* molekuler. Preparasi ligan uji dari senyawa yang terkandung dalam tanaman akar manis dengan menggunakan MarvinSketch dan VegaZZ, preparasi protein target dengan menggunakan AutodockTools, validasi ligan dan protein target menggunakan Autodock 4, serta visualisasi hasil *docking* menggunakan *Discovery Studio* kemudian senyawa terbaik hasil *docking* dilakukan uji profil farmakokinetik menggunakan ADMETLab.

Hasil penelitian didapatkan senyawa dari akar manis memiliki aktivitas yang baik terhadap protein target 3CLpro dan PLpro. Interaksi yang terbentuk dari kandungan senyawa akar manis terhadap protein 3CLpro membentuk ikatan asam amino yang serupa dengan ligan uji adalah senyawa prenyllicoflavone A, sedangkan pada protein PLpro senyawa terbaik yang interaksinya serupa dengan ligan asli adalah shinflavanone. Berdasarkan analisis profil ADME lima senyawa menghasilkan nilai yang beragam, tetapi masih dalam rentang yang baik. Senyawa yang memiliki profil farmakokinetika terbaik adalah beta-sitosterol.

Kata Kunci : *Coronavirus*; akar manis; *docking* molekuler

ABSTRACT

ANGGRAENI S. A., 2020, SCREENING MOLECULAR TARGET OF *LICORICE* CHEMICAL CONTENT (*Glycyrrhiza glabra* L.) AGAINST OF *CORONAVIRUS* THERAPY TARGET WITH MOLECULAR *DOCKING* METHOD, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA

Coronavirus disease 2019 (COVID-19) was a disease caused by a virus that infects cells in the airways that line the alveoli. The molecular targets that have been studied were *papain like protease* (PLpro) and *3-chymotrypsin like protease* (3CLpro). Previous studies reported that licorice root can stimulate the secretion of IFN- β which had antiviral activity. This study aimed to determine the content of compounds in licorice root against the target of corona virus therapy and to predict the pharmacokinetic profile of the selected compounds based on the results of molecular *docking*.

The method used in this research is molecular *docking*. Preparation of test ligands from compounds contained in liquorice plants using MarvinSkeeth and VegaZZ, preparation of target proteins using AutodockTools, validation of ligands and target proteins using Autodock 4, visualization of *docking* results using Discovery Studio then the best *docking* results were tested, and pharmacokinetic profile using ADMETLab.

The results showed that compounds from licorice root had good activity against the target protein 3CLpro and PLpro. The interaction formed from the content of licorice compounds against 3CLpro protein to form amino acid bonds similar to the test ligand is the prenyllicoflavone A compound, while in the PLpro protein the best compound whose interaction is similar to the original ligand is shinflavanone. Based on the ADME profile analysis, the five compounds produced various values, but were still in a good range. The compound with the best pharmacokinetic profile was beta sitosterol.

Keyword : *Coronavirus; licorice; docking* molekuler