

ABSTRAK

AMARA FISMASARI, 2021, ANALISIS MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA TANAMAN SEREH (*Cymbopogon citratus*) DAN CENGKEH (*Syzygium aromaticum*) SEBAGAI KANDIDAT TERAPI COVID-19 DENGAN METODE DOCKING MOLEKULER, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. Apt. Rina Herowati, M.Si. dan Apt. Ismi Puspitasari, M.Farm.

Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) merupakan penyakit yang disebabkan oleh infeksi virus jenis *coronavirus* jenis SARS-CoV-2. Tanaman serih (*Cymbopogon citratus*) dan cengkeh (*Syzygium aromaticum*) berperan sebagai antivirus dengan menghambat produksi NO dan ekspresi iNOS di dendritik sel serta menghambat enzim helikase yang berperan dalam proses replikasi virus. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui prediksi pola interaksi serta profil farmakokinetik dari senyawa yang terkandung pada tanaman serih dan cengkeh.

Penelitian dilakukan menggunakan metode penambatan molekuler PLANTS dengan 14 senyawa kimia pada tanaman serih dan cengkeh serta reseptor target COVID-19 (PLpro, 3CLpro, dan RdRp). Parameter penambatan molekuler berupa pola interaksi, kesamaan asam amino, dan *binding pocket*. Parameter prediksi profil farmakokinetik berupa absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas diprediksi menggunakan ADMETLab 2.0.

Hasil penelitian menunjukkan beberapa senyawa dari tanaman serih dan cengkeh memiliki pola interaksi dan afinitas, kesamaan asam amino, serta *binding pocket* yang baik terhadap reseptor COVID-19. Senyawa citronellol, luteolin, *geranyl acetate*, *quercetin*, *isoscoparin*, dan *cynaroside* pada tanaman serih memiliki pola interaksi yang baik terhadap reseptor. Pada tanaman cengkeh, senyawa *quercetin*, isobiflorin, kaempferol, biflorin, dan bicornin memiliki pola interaksi yang baik terhadap reseptor. Prediksi profil ADMET diperoleh senyawa *isoscoparin* dan *cynaroside* pada tanaman serih serta senyawa bicornin, biflorin, dan isobiflorin pada tanaman cengkeh memiliki prediksi profil farmakokinetik dan toksisitas yang baik.

Kata kunci : COVID-19, *Cymbopogon citratus*, *Syzygium aromaticum*, PLANTS, ADMETLab 2.0

ABSTRACT

MOLECULAR ANALYSIS THE CHEMICAL CONTENT OF LEMOGRASS (*Cymbopogon citratus*) AND CLOVE (*Syzygium aromaticum*) AS CANDIDATES FOR COVID-19 THERAPY USING MOLECULAR DOCKING METHOD, THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA, Supervised by Dr. Apt. Rina Herowati, M. Si. And Apt. Ismi Puspitasari, M. Farm.

Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) is a disease caused by infection with the SARS-CoV-2 type of coronavirus. Lemongrass (*Cymbopogon citratus*) and clove (*Syzygium aromaticum*) has antiviral activity by inhibiting NO production and iNOS expression in dendritic cells and inhibiting helicase enzymes in the viral replication process. This study aims to determine the prediction of the interaction pattern and the pharmacokinetic profile of compounds contained in lemongrass and cloves.

This research was conducted using the PLANTS molecular docking method with 14 chemical compounds in lemongrass and cloves also receptors of COVID-19 (PLpro, 3CLpro, and RdRp). The parameters of the molecular docking are interaction patterns, amino acid similarity, and binding pocket. Parameters predicted for pharmacokinetic profiles are absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity using ADMETLab 2.0.

The results showed that several compounds from lemongrass and cloves had patterns of interaction and affinity, similarity in amino acids, and good binding pockets to COVID-19's receptors. Citronellol, luteolin, geranyl acetate, quercetin, isoscoparin, and cynaroside in lemongrass had a good interaction pattern with receptors. Quercetin, isobiflorin, kaempferol, biflorin, and bicornin from cloves had a good interaction with receptors. Prediction of the ADMET profile obtained that isoscoparin and cynaroside from lemongrass and bicornin, biflorin, and iso biflorin from clove had good predictions of pharmacokinetic and toxicity profiles.

Keyword : COVID-19, *Cymbopogon citratus*, *Syzygium aromaticum*, PLANTS, ADMETLab 2.0