

ABSTRAK

MUHAMMAD ABDUL ROZZAAQ, 2021, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER TERHADAP PROTEIN TARGET COVID-19 DAN PREDIKSI PROFIL FARMAKOKINETIKA KANDUNGAN KIMIA TANAMAN TIN (*Ficus carica* L.), PROPOSAL SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. Rina Herowati, M.Si., Apt dan Desi Purwaningsih, S.Pd., M.Si.

COVID-19 atau dikenal dengan coronavirus merupakan salah satu virus patogen yang menyerang sistem pernapasan manusia. COVID-19 disebabkan akibat infeksi virus *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2* (SARS-CoV-2). Tanaman tin (*Ficus carica* L.) memiliki aktivitas sebagai antivirus dengan mencegah absorpsi dan penetrasi virus dan menghambat replikasi virus. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui prediksi afinitas dan pola interaksi serta profil ADMET dari senyawa yang terkandung pada tanaman tin.

Penelitian ini menggunakan metode penambatan molekuler tanaman tin (*Ficus carica* L.) sebagai senyawa uji dan PLpro, 3CLpro, dan RdRp sebagai protein target COVID-19. Penambatan molekuler menggunakan *software* PLANTS, YASARA, Vega ZZ, MarvinSketch, dan Biovia DS. Prediksi ADMET menggunakan *webserver* ADMETLab 2.0.

Hasil penelitian menunjukkan beberapa senyawa tanaman tin yang memiliki nilai afinitas baik, interaksi asam amino yang berperan, dan *binding pocket* yang mirip dengan ligan asli. Senyawa kuersetin, luteolin, kaempferol, lupeol, asam kafeat, dan asam ferulat memiliki pola interaksi, afinitas, serta *binding pocket* yang baik terhadap protein target COVID-19. Prediksi profil ADMET pada penelitian ini diperoleh senyawa asam kafeat dan asam ferulat memiliki hasil ADMET yang baik sehingga kedua senyawa tersebut diprediksi memiliki profil farmakokinetika terbaik dan memiliki interaksi yang baik dengan protein target COVID-19.

Kata kunci : COVID-19, tanaman tin, *Ficus carica* L., penambatan molekuler, PLANTS, ADMETLab 2.0

ABSTRACT

MUHAMMAD ABDUL ROZZAAQ, 2021, ANALYSIS OF MOLECULAR DOCKING ON COVID-19 TARGET PROTEIN AND PHARMACOKINETIC PROFILE PREDICTION OF THE CHEMICAL CONTENT OF FIG PLANTS (*Ficus carica* L.), PROPOSAL OF THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. Rina Herowati, M.Sc., Apt and Desi Purwaningsih, S.Pd., M.Si.

COVID-19 or known as coronavirus is one of the pathogenic viruses that attack the human respiratory system. COVID-19 is caused by severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2). Fig plants (*Ficus carica* L.) have antiviral activity by preventing virus absorption and penetration and inhibiting viral replication. This study aims to find out the prediction of affinity and interaction patterns as well as the ADMET profile of compounds contained in fig plants.

The study used the plant tin molecular propagation method (*Ficus carica* L.) as a test compound and PLpro, 3CLpro, and RdRp as the target protein COVID-19. Docking molecular uses PLANTS, YASARA, Vega ZZ, MarvinSketch, and Biovia DS software.

The results showed several plant tin compounds that had good affinity values, amino acid interactions at play, and binding pockets similar to native ligands. Quercetin, luteolin, kaempferol, lupeol, kafeic acid, and ferulic acid compounds have good interaction patterns, affinities, and binding pockets to the target protein COVID-19. The ADMET profile prediction in this study obtained by kafeic acid and ferulic acid compounds had good ADMET results so that both compounds are predicted to have the best pharmacokinetic profile and have good interaction with the target protein COVID-19.

Keywords : COVID-19, figs, *Ficus carica* L., docking molecular, PLANTS, ADMETLab 2.0