

ABSTRAK

Nama : Marcel Yudha
Program Studi : Farmasi
Judul Skripsi : Potensi Senyawa Aktif Daun Pucuk Merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) terhadap Main Protease pada SARS-CoV-2: *Studi In Silico*

Corona virus disease-19 (COVID-19) adalah penyakit yang disebabkan oleh SARS-CoV-2 (*Severe Acute Respiratory Syndrome-2*). Salah satu protein yang berperan dalam proses replikasi virus SARS-CoV-2 adalah main protease, sehingga protein ini menjadi target utama dalam penemuan obat sebagai antivirus terhadap COVID-19. Tanaman pucuk merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) memiliki kandungan senyawa triterpenoid yang memiliki aktivitas sebagai antivirus. Pencarian kandidat senyawa obat yang berpotensi dalam mengobati penyakit dapat dikembangkan dengan studi *in silico*. Penelitian ini bertujuan untuk menguji aktivitas senyawa aktif pada daun Pucuk Merah terhadap penghambatan main protease virus SARS-CoV-2. Metode penelitian yang digunakan berbasis *in silico* melalui teknik molekuler *docking*. Berdasarkan hasil studi *in silico* dapat diperoleh dua (2) senyawa aktif dari daun pucuk merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) yang memiliki penghambatan terhadap main protease protein SARS-CoV-2 lebih baik dari Oseltamivir yaitu bis (2-etil heksil) ftalat dan bis (2-etil heksil) heksanadioat dengan skor *docking* berturut-turut adalah -91,82 dan -90,64. Dalam proses prediksi ADMET, diperoleh hasil senyawa bis (2-etil heksil) ftalat dan bis (2-etil heksil) heksanadioat memiliki sifat absorpsi yang baik, dapat terdistribusi secara merata seperti pada plasma darah, dapat menjadi substrat dan inhibitor pada berbagai jenis sitokrom pada proses metabolisme, dan senyawa tidak bersifat mutagenik.

Kata Kunci:

In silico, Main protease, Penambatan molekul, Pucuk Merah, SARS-CoV-2, *Syzygium myrtifolium* Walp.

ABSTRACT

Name : Marcel Yudha
Major : Pharmacy
Title : Potency of Active Compounds of Pucuk Merah Leaves (*Syzygium myrtifolium* Walp.) for Main Proteases in SARS-CoV-2: In Silico Study

Corona virus disease-19 (COVID-19) is a disease caused by SARS-CoV-2 (*Severe Acute Respiratory Syndrome 2*). One of the proteins that play a role in the process of replicating the SARS-CoV-2 virus is the main protease, so this protein is the main target in finding drugs as antivirals against COVID-19. Red shoots (*Syzygium myrtifolium* Walp.) contain triterpenoid compounds which have antiviral activity. The search for candidate drug compounds that have the potential to treat disease can be developed with *in silico* studies. This study aims to examine the activity of the active compounds in Pucuk Merah leaves against inhibition of the main protease of the SARS-CoV-2 virus. The research method used is *in silico* based through molecular docking techniques. Based on the results of an *in silico* study, it was possible to obtain two (2) active compounds from red shoot leaves (*Syzygium myrtifolium* Walp.) which had better inhibition of the main protein protease SARS-CoV-2 than oseltamivir, namely bis (2-ethyl hexyl) phthalate and bis (2-ethyl hexyl) hexanadioate with docking scores of -91.82 and -90.64, respectively. In the ADMET prediction process, it was obtained that the compounds bis (2-ethyl hexyl) phthalate and bis (2-ethyl hexyl) hexanadioate had good absorption properties, could be distributed evenly like in blood plasma, could be substrates and inhibitors of various types of cytochromes in metabolic processes, and the compound is not mutagenic.

Keywords:

In silico, Main protease, Molecular Docking, Pucuk Merah, SARS-CoV-2, *Syzygium myrtifolium* Walp.