

ABSTRAK

Kasus pertama COVID-19 dilaporkan terjadi di Wuhan China pada bulan Desember 2019. Penyakit ini menyebar dengan cepat hingga menjadi perhatian dunia dan menjadi ancaman bagi kesehatan masyarakat. Berdasarkan penelitian sebelumnya, dengan metode *Molecular Docking* ditemukan senyawa Flavonoid di daun jambang menunjukkan aktivitas penghambatan yang kuat pada SARS-CoV-2 *Main Protease*. Penelitian ini memiliki tujuan untuk menentukan senyawa flavonoid Tanaman Krokot (*Portilaca Oriceae* L) yang dapat berinteraksi dengan reseptor SARS-CoV-2 *Main Protease* dan dapat digunakan sebagai kandidat obat COVID-19 dengan *virtual screening*. Hasil *Molecular Docking* 10 senyawa turunan flavonoid Tanaman Krokot terhadap reseptor *Main Protease* (6XBG), dari penelitian ini didapatkan senyawa Isorhamnetin memiliki energi bebas Gibbs (ΔG) terendah sebesar - 8.56 kcal/mol. *Molecular Dynamic* yang dihasilkan senyawa terbaik Isorhamnetin berupa nilai RMSD dan RSMF cukup stabil. Hasil *drug scan*, senyawa terbaik memenuhi 5 aturan Lipinski. Hasil prediksi farmakokinetik dan toksisitas, senyawa terbaik memiliki profil farmakokinetik yang cukup baik, dan tidak toksik. Dari hasil ini didapatkan bahwa senyawa Isorhamnetin Tanaman Krokot diprediksi berinteraksi dengan reseptor SARS-CoV-2 *Main Protease* (6XBG) berpotensi sebagai kandidat obat pada COVID-19.

Kata Kunci: SARS-CoV-2, *Main Protease*, COVID-19, Flavonoid Tanaman Krokot, *Virtual Screening*



KARAWANG

ABSTRACT

The first case of COVID-19 was reported in Wuhan, China in December 2019. This disease spread quickly to the point of global concern and became a threat to public health. Based on previous research, using the Molecular Docking method it was found that Flavonoids show strong inhibitory activity on SARS-CoV-2 Main Protease. This research aims to determine the flavonoid compounds of the Purslane Plant (Portulaca Oriceae L) which can interact with the SARS-CoV-2 Main Protease receptor and can be used as a candidate for COVID-19 therapy with virtual screening. Results of Molecular Docking of 10 Purslane Plant flavonoid derivative compounds against the Main Protease receptor (6XBG), from this research it was found that the Isorhamnetin compound had the lowest Gibbs free energy (ΔG) of -8.56 kcal/mol. The molecular dynamics produced by the best compound Isorhamnetin in the form of RMSD and RSMF values are quite stable. The drug scan results showed that the best compound fulfilled Lipinski's 5 rules. From the pharmacokinetic and toxicity prediction results, the best compound has a fairly good pharmacokinetic profile and is not toxic. From these results it was found that the Purslane Plant Isorhamnetin compound is predicted to interact with the SARS-CoV-2 Main Protease (6XBG) receptor as a potential drug candidate for COVID-19.

Keywords: SARS-CoV-2, Main Protease, COVID-19, Purslane Plant Flavonoids, Virtual Screening

